



Rui Filipe Alves Reis

Licenciado em Ciências da Engenharia Mecânica

Análise de tensão em materiais compósitos de microestrutura periódica

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia Mecânica

Orientador: Prof. Doutor Pedro Samuel Gonçalves Coelho,
Prof. Auxiliar da Faculdade de Ciências e Tecnologias da
Universidade Nova de Lisboa

Júri:

Presidente: Prof^a Doutora Marta Isabel Pimenta Verdete da Silva Carvalho

Arguentes: Prof. Doutor João Mário Burguete Botelho Cardoso

Vogais: Prof. Doutor Pedro Samuel Gonçalves Coelho



FACULDADE DE
CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

Março, 2016

Copyright

Análise de tensão em materiais compósitos de microestrutura periódica.

Copyright ©Rui Filipe Alves Reis, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa.

A Faculdade de Ciências e Tecnologia e a Universidade Nova de Lisboa têm o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar esta dissertação através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de forma digital, ou por qualquer outro meio conhecido ou que venha a ser inventado, e de a divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua cópia e distribuição com objectivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor.

Agradecimentos

Em primeiro lugar quero agradecer ao meu orientador, Professor Doutor Pedro Coelho, pela disponibilidade e dedicação mostradas ao longo de toda a dissertação e que tornaram a mesma possível. Agradeço o voto de confiança feito, os conhecimentos transmitidos e a motivação dada no decorrer do trabalho.

Ao Departamento de Engenharia Mecânica e Industrial (DEMI) por disponibilizar as instalações e equipamentos que foram indispensáveis para o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço aos meus pais pela confiança e paciência demonstrados e pelo investimento que fizeram em mim, permitindo-me obter uma formação académica. Uma nota ainda para todos os restantes familiares que também demonstraram o seu apoio e me motivaram.

Por último, mas com igual importância, quero agradecer a todos os meus amigos com quem tive oportunidade de privar mais de perto, ao longo destes anos. O percurso académico deve, para além de um período de formação pessoal, ser de companheirismo e, por isso, o meu obrigado pela amizade que demonstraram.

Resumo

Esta dissertação tem como principal foco a análise de efeitos de escala com critérios de tensão, em materiais compósitos de microestrutura periódica.

É utilizado um modelo de material tridimensional compósito (duas fases sólidas) ou poroso (sólido e vazio) obtido pela repetição de uma célula de base unitária em todas as direções espaciais.

A teoria da homogeneização é utilizada para estimar as propriedades elásticas de materiais compósitos periódicos, com o objetivo de tratar um meio heterogêneo como um meio homogêneo com propriedades mecânicas equivalentes.

As topologias da célula de base unitária são obtidas através de um problema de otimização topológica, utilizando o método da homogeneização inversa. Este é formulado como a maximização da rigidez sujeito a um constrangimento de volume. Sendo que esta é uma formulação bastante limitada e não oferece características apropriadas para fabrico ou aplicações específicas são, também, utilizados constrangimentos de permeabilidade. É utilizada uma amostra representativa de diferentes topologias, geradas para diferentes estados de tensão e é apresentado para cada uma o estado de anisotropia respetivo.

Na análise de efeitos de escala com critérios de tensão distinguem-se dois estudos: (1) determinação de campos de tensão, ao nível da célula de base unitária central da microestrutura, através da teoria da homogeneização e validação da mesma, pela comparação desses resultados com os obtidos através da simulação computacional de ensaios mecânicos normalizados, para um número crescente de repetições da célula de base unitária; (2) aplicação de ensaios mecânicos normalizados com a finalidade de averiguar se existe um padrão periódico na distribuição da tensão, ao nível da microestrutura, para um número crescente de repetições.

Os resultados mostram que um fator de escala baixo é suficiente para substituir um compósito heterogêneo por um material homogêneo com campo de tensão calculado pela teoria da homogeneização.

Palavras-chave:

Tensão, Homogeneização, Material, Compósito, Celular, Otimização, Topologia

Abstract

This work's main focus is the scale-size effect analysis with stress criteria regarding periodic microstructure composite materials.

A three-dimensional material model is used for a composite material (two solid phases) or porous material (solid and void phases), which are obtained by repeating an unit cell along all spatial directions.

The homogenization theory is used to compute the elastic properties of periodic composite materials replacing a heterogeneous composite by the equivalent homogeneous material.

The unit-cell topologies are obtained by a topology optimization algorithm using the inverse homogenization method. The topology optimization problem is formulated as the compliance minimization subject to volume or permeability constraints. These last ones are used because they offer a far-reaching approach when it comes to finding appropriate material properties to manufacture and be employed in practical solutions. The topologies are obtained for different macroscopic stress fields and a representative sample is used along with the corresponding anisotropy measure.

The scale-size effect analysis includes two different studies: (1) convergence analysis of stress field to homogenization predictions (2) finding if a periodic stress field is obtained when standard numerical tests are applied to the composite.

The obtained results show that it is sufficient to have a low scale factor to replace the non-homogeneous composite by the equivalent homogeneous material with the stress field computed by homogenization.

Keywords:

Stress, Homogenization, Material, Composite, Cellular, Optimization, Topology

Índice

Copyright	iii
Agradecimentos	v
Resumo.....	vii
Abstract	ix
Índice de Tabelas	xiii
Índice de Figuras.....	xv
Simbologia e notações	xxi
1 Introdução	1
1.1 OBJETIVOS DA DISSERTAÇÃO.....	3
1.2 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	4
2 Estado da arte	7
2.1 OTIMIZAÇÃO ESTRUTURAL.....	7
2.2 MATERIAIS COMPÓSITOS DE MICROESTRUTURA PERIÓDICA E EFEITOS DE ESCALA	10
2.3 PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO COM CRITÉRIOS DE TENSÃO.....	12
2.3.1 ε -relaxation.....	13
2.3.2 qp-approach	16
2.3.3 Relaxamento da tensão	17
2.3.4 Comparação entre os métodos de relaxamento.....	18
2.3.5 Implementação de constrangimentos de tensão.....	19
2.3.6 Formulação do problema de otimização	20
3 Análise e otimização	23
3.1 EQUAÇÕES DE ELASTICIDADE.....	23
3.1.1 Relação deslocamento-deformação.....	24
3.1.2 Equações de equilíbrio.....	24
3.1.3 Relações Constitutivas	25
3.1.4 Materiais isotrópicos.....	27
3.1.5 Tensão equivalente de von-Mises.....	29
3.2 MODELO DE MATERIAL	30

3.3	PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO.....	32
3.3.1	<i>Análise de sensibilidades.....</i>	34
3.3.2	<i>Técnicas de filtragem</i>	34
3.3.3	<i>MMA.....</i>	36
3.4	HOMOGENEIZAÇÃO.....	37
3.4.1	<i>Método da homogeneização inversa.....</i>	39
3.4.2	<i>Análise de tensão pela homogeneização.....</i>	42
3.5	MEDIDAS DE ANISOTROPIA.....	42
4	Análise de efeitos de escala.....	45
4.1	PRÉ-PROCESSAMENTO.....	47
4.1.1	<i>Ensaaios normalizados.....</i>	49
4.2	PÓS-PROCESSAMENTO.....	58
4.2.1	<i>Análise de convergência da tensão.....</i>	58
4.2.2	<i>Análise da periodicidade.....</i>	61
5	Resultados.....	63
5.1	TOPOLOGIAS ÓTIMAS.....	63
5.2	EFEITOS DE ESCALA.....	66
5.2.1	<i>Análise de convergência de tensão.....</i>	66
5.2.2	<i>Análise da periodicidade.....</i>	86
6	Conclusões e desenvolvimentos futuros.....	93
	Referências bibliográficas	97
	Anexos.....	105
	Anexo I.....	107
	Anexo II.....	108
	Anexo III	112

Índice de Tabelas

Capítulo 3

TABELA 3.1: RELAÇÕES ENTRE CONSTANTES ELÁSTICAS.	28
---	----

Capítulo 4

TABELA 4.1: TIPOS DE CARREGAMENTOS UTILIZADOS NOS ENSAIOS NORMALIZADOS.	48
TABELA 4.2: EQUAÇÕES DE DESLOCAMENTO IMPOSTO PARA AS C.F. DE DIRICHLET.	52

Capítulo 5

TABELA 5.1: ESTADOS DE TENSÃO NORMAIS UTILIZADOS E TOPOLOGIAS ÓTIMAS CORRESPONDENTES PARA CONSTRANGIMENTOS DE VOLUME E DE PERMEABILIDADE. REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DA ANISOTROPIA E CORRESPONDENTE VALOR DE \mathcal{A} [Pa].....	64
TABELA 5.2: ESTADOS DE TENSÃO AO CORTE UTILIZADOS E TOPOLOGIAS ÓTIMAS CORRESPONDENTES PARA CONSTRANGIMENTOS DE VOLUME E DE PERMEABILIDADE. REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DA ANISOTROPIA E CORRESPONDENTE VALOR DE \mathcal{A} [Pa].....	65
TABELA 5.3: EXEMPLO DE TENSORES DE ELASTICIDADE HOMOGENEIZADOS, E^H PARA MATERIAL CELULAR $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$	66
TABELA 5.4: RESUMO ESTATÍSTICO DOS DESVIOS REPRESENTADOS NAS FIGURAS 5.1 A 5.3. MÉDIA \bar{e} , DESVIO PADRÃO S E DESVIOS EXTREMOS (MAX E MIN) SÃO APRESENTADOS [%].	71
TABELA 5.5: RESUMO ESTATÍSTICO DOS DESVIOS REPRESENTADOS NAS FIGURAS 5.4 A 5.6. MÉDIA \bar{e} , DESVIO PADRÃO S E DESVIOS EXTREMOS (MAX E MIN) SÃO APRESENTADOS [%].	75
TABELA 5.6: RESUMO ESTATÍSTICO DOS DESVIOS REPRESENTADOS NAS FIGURAS 5.7 A 5.9. MÉDIA \bar{e} , DESVIO PADRÃO S E DESVIOS EXTREMOS (MAX E MIN) SÃO APRESENTADOS [%].	79
TABELA 5.7: RESUMO ESTATÍSTICO DOS RESULTADOS REPRESENTADOS NA FIGURA 5.10. MÉDIA \bar{e} , DESVIO PADRÃO S E DESVIOS EXTREMOS (MAX E MIN) SÃO APRESENTADOS [%].....	81
TABELA 5.8: RESUMO ESTATÍSTICO DOS RESULTADOS REPRESENTADOS NA FIGURA 5.11. MÉDIA \bar{e} , DESVIO PADRÃO S E DESVIOS EXTREMOS (MAX E MIN) SÃO APRESENTADOS [%].....	82
TABELA 5.9: RESUMO ESTATÍSTICO DOS RESULTADOS REPRESENTADOS NA FIGURA 5.12. MÉDIA \bar{e} , DESVIO PADRÃO S E DESVIOS EXTREMOS (MAX E MIN) SÃO APRESENTADOS [%].....	83
TABELA 5.10: RESUMO ESTATÍSTICO DOS RESULTADOS REPRESENTADOS NA FIGURA 5.13. MÉDIA \bar{e} , DESVIO PADRÃO S E DESVIOS EXTREMOS (MAX E MIN) SÃO APRESENTADOS [%].	84
TABELA 5.11: RESUMO ESTATÍSTICO DOS RESULTADOS REPRESENTADOS NA FIGURA 5.14. MÉDIA \bar{e} , DESVIO PADRÃO S E DESVIOS EXTREMOS (MAX E MIN) SÃO APRESENTADOS [%].	85

Anexos

TABELA A.1: TABELA COM RESULTADOS DE MÓDULO DE YOUNG OBTIDOS POR ENSAIOS MECÂNICOS, PARA VÁRIAS AMOSTRAS DE PCL.....	105
TABELA A.2: RESUMO ESTATÍSTICO DOS DESVIOS REPRESENTADOS NAS FIGURAS A.4 A A.6. MÉDIA \bar{e} , DESVIO PADRÃO s E DESVIOS EXTREMOS (MAX E MIN) SÃO APRESENTADOS [%].....	113

Índice de Figuras

CAPÍTULO 1

FIGURA 1.1: ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	5
--	---

CAPÍTULO 2

FIGURA 2.1: TIPOS DE OTIMIZAÇÃO ESTRUTURAL. (A) OTIMIZAÇÃO DIMENSIONAL; (B) OTIMIZAÇÃO DE FORMA; (C) OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA. O PROBLEMA INICIAL ESTÁ REPRESENTADO À ESQUERDA E A ESTRUTURA OTIMIZADA À DIREITA. ADAPTADO DE SIGMUND (2000).....	9
FIGURA 2.2: RIGIDEZ RELATIVA EM FUNÇÃO DA DENSIDADE PARA VÁRIOS VALORES DE PENALIZAÇÃO, p . ADAPTADO DE LEE (2012).....	10
FIGURA 2.3: (A) AMOSTRAS DE PCL DE DIFERENTES TAMANHOS E IDENTIFICAÇÃO DA CÉLULA UNITÁRIA. (B) TESTE DE COMPRESSÃO NA MÁQUINA MTS (MECHANICAL TESTING SYSTEM). ADAPTADO DE COELHO <i>ET AL</i> (2015).....	11
FIGURA 2.4: DISTRIBUIÇÃO DE DENSIDADE DE MATERIAL NA SECÇÃO TRANSVERSAL, OTIMIZADA PARA RIGIDEZ TORSIONAL. ADAPTADO DE LIPTON & STUEBNER (2006).....	13
FIGURA 2.5: REGIÃO ADMISSÍVEL NUM PROBLEMA DE TRELIÇA COMPOSTA POR TRÊS BARRAS. QUANTO MENOR FOR A PERTURBAÇÃO ε MAIS PERTO ESTARÁ O PONTO B DO VERDADEIRO ÓTIMO. ADAPTADO DE LEE (2012).....	15
FIGURA 2.6: DOMÍNIO DE PROJETO DO PROBLEMA DE TRELIÇA COMPOSTO POR DUAS BARRAS, UTILIZANDO O QP -APPROACH. AS LINHAS A CHEIO REPRESENTAM OS CONSTRANGIMENTOS RELAXADOS. AS LINHAS A TRAÇO INTERROMPIDO REPRESENTAM OS CONSTRANGIMENTOS ORIGINAIS. ADAPTADO DE VERBART (2015).....	17
FIGURA 2.7: FUNÇÕES DE RELAXAMENTO. O PARÂMETRO DE RELAXAMENTO $\varepsilon_{qp} > 0$ É ESCOLHIDO TAL QUE AS FUNÇÕES INTERSETEM EM (A) $\rho = 0.01$ E (B) $\rho = 0.1$. ADAPTADO DE VERBART (2015).....	19
FIGURA 2.8: FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO DA MASSA, RIGIDEZ E TENSÃO. $\alpha = 0.9$ É UTILIZADO COMO COEFICIENTE DE PENALIZAÇÃO DA FUNÇÃO DE MASSA E $p = 3.0$ PARA A FUNÇÃO SIMP. ADAPTADO DE LEE (2012).....	21

CAPÍTULO 3

FIGURA 3.1: DIAGRAMA QUE DESCREVE A RELAÇÃO ENTRE DESLOCAMENTOS, DEFORMAÇÕES, TENSÕES E FORÇAS.	23
FIGURA 3.3: MODELO DE MATERIAL DE MATERIAL COMPÓSITO DE MICROESTRUTURA PERIÓDICA COM PADRÃO DE $5 \times 5 \times 5$ (NA TEORIA VAI PARA INFINITO) CÉLULAS DE BASE DE DIMENSÃO CARACTERÍSTICA D E UMA CÉLULA DE BASE UNITÁRIA COM DIMENSÃO CARACTERÍSTICA d . 31	31

FIGURA 3.4: REPRESENTAÇÃO DA MALHA DE ELEMENTOS FINITOS UTILIZADA NO DOMÍNIO Y E EXEMPLO DE TOPOLOGIA ÓTIMA.	31
FIGURA 3.5: ESQUERDA: NÃO EXISTE FILTRO E HÁ PRESENÇA DE <i>CHECKERBOARD</i> . DIREITA: EXISTE FILTRO; NÃO HÁ PRESENÇA DE <i>CHECKERBOARD</i> MAS EXISTE UMA CAMADA TRANSITÓRIA, A CINZENTO, ENTRE SÓLIDO E VAZIO. ADAPTADO DE HOLMBERG (2013).	34
FIGURA 3.6: VIZINHANÇA DO ELEMENTO k DEFINIDA POR r_{min} . O CÁLCULO DA MÉDIA DAS SENSIBILIDADES NO ELEMENTO k CONTEMPLA TODOS OS ELEMENTOS CUJO CENTRO ESTEJA CONTIDO DENTRO DA REGIÃO DELINEADA POR r_{min} . ADAPTADO DE AMIANO (2015).	35
FIGURA 3.7: MÉTODO DA HOMOGENEIZAÇÃO UTILIZADO NA CARACTERIZAÇÃO DE UM MATERIAL COMPÓSITO CELULAR DE MICROESTRUTURA PERIÓDICA.	39
FIGURA 3.8: HOMOGENEIZAÇÃO VS HOMOGENEIZAÇÃO INVERSA.	40
FIGURA 3.9: TOPOLOGIA INICIAL CONSIDERADA NO PROBLEMA DE MINIMIZAÇÃO DE <i>COMPLIANCE</i> , PARA UMA CÉLULA $20 \times 20 \times 20$. OS ELEMENTOS ASSUMEM UM VALOR DE DENSIDADE DE 0.75 NAS PAREDES E 0.407 NO INTERIOR (FRAÇÃO VOLUMICA DE 50%). ADAPTADO DE COELHO (2009).	41
FIGURA 3.10: ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO UTILIZADO PARA PROBLEMA DE MINIMIZAÇÃO DE <i>COMPLIANCE</i> . ADAPTADO DE AMIANO (2015).	41

CAPÍTULO 4

FIGURA 4.1: SIMULAÇÃO NUMÉRICA EM ANSYS.	46
FIGURA 4.2: PRÉ-PROCESSAMENTO EM ANSYS.	49
FIGURA 4.3: CONDIÇÕES DE DIRICHLET DEFINIDAS PARA A) CARREGAMENTO LONGITUDINAL E B) CARREGAMENTO AO CORTE. ADAPTADO DE AMIANO (2015).	51
FIGURA 4.4: DOMÍNIO CÚBICO COM ARESTAS NUMERADAS.	54
FIGURA 4.5: TESTES NUMÉRICOS NAS CONDIÇÕES DE NEUMANN (DOMÍNIO BIDIMENSIONAL PARA UMA MAIOR SIMPLICIDADE). A) TESTE LONGITUDINAL; B) TESTE AO CORTE. ADAPTADO DE AMIANO (2015).	55
FIGURA 4.6: CUBO UNITÁRIO COM APLICAÇÃO DE CARREGAMENTO QUE COMBINA DUAS TENSÕES AO CORTE, NO PLANO xy E xz	56
FIGURA 4.7: TESTE NUMÉRICO COM APLICAÇÃO DE CONDIÇÕES DE FRONTEIRA DE NEUMANN, PARA UM ESTADO DE CARGA TRIAXIAL/HIDROSTÁTICO (COMBINAÇÃO DE TENSÕES LONGITUDINAIS). TENSÕES SÃO APLICADAS DIRETAMENTE NOS ELEMENTOS. CINZENTO CORRESPONDE A MATERIAL E BRANCO A VAZIO.	57
FIGURA 4.8: LOCALIZAÇÃO DOS ELEMENTOS SHELL UTILIZADOS PARA IMPEDIR MOVIMENTOS DE CORPO RÍGIDO. NO NÓ PERTENCENTE À ORIGEM SÃO IMPOSTAS C.F. DE DESLOCAMENTO QUE IMPEDEM QUALQUER TRANSLAÇÃO OU ROTAÇÃO.	58
FIGURA 4.9: CUBO UNITÁRIO COM $n \times n \times n$ REPETIÇÕES DA CÉLULA UNITÁRIA.	59

FIGURA 4.10: EFEITOS DE ESCALA NA CÉLULA DE BASE CENTRAL PARA UM FATOR DE ESCALA n CRESCENTE. APENAS METADE DO VOLUME DO COMPÓSITO Ψ É REPRESENTADO E CÉLULA CENTRAL ESTÁ REALÇADA. PARA $n = 2$, $n = 4$ E $n = 6$, A COMPARAÇÃO REALIZA-SE NA CÉLULA DESCENTRADA. ADAPTADO DE COELHO <i>ET AL</i> (2016).	60
FIGURA 4.11: (A) REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA EM DOMÍNIO BIDIMENSIONAL E TRIDIMENSIONAL DE CÉLULAS DE BASE COM TOPOLOGIA DESCENTRADA. (B) TOPOLOGIA NORMAL (EM CIMA) E TOPOLOGIA DESCENTRADA (EM BAIXO). ADAPTADO DE COELHO <i>ET AL</i> (2015).....	60
FIGURA 4.12: AVALIAÇÃO DA PERIODICIDADE ATRAVÉS DA LEITURA DA TENSÃO AO LONGO DE COLUNAS DE ELEMENTOS, NUM DETERMINADO PLANO xy DE UM COMPÓSITO COM FATOR DE ESCALA $n = 2$	61
FIGURA 4.13: RESUMO DAS POTENCIALIDADES OFERECIDAS PELOS CÓDIGOS APDL DESENVOLVIDOS.	62

CAPÍTULO 5

FIGURA 5.1: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA HIDROSTÁTICO COM CONSTRANGIMENTO DE VOLUME E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE NEUMANN. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) $1 \times 1 \times 1$; B) $2 \times 2 \times 2$; C) $3 \times 3 \times 3$; D) $4 \times 4 \times 4$; E) $5 \times 5 \times 5$; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	68
FIGURA 5.2: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA HIDROSTÁTICO COM CONSTRANGIMENTO DE VOLUME E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) $1 \times 1 \times 1$; B) $2 \times 2 \times 2$; C) $3 \times 3 \times 3$; D) $4 \times 4 \times 4$; E) $5 \times 5 \times 5$; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	69
FIGURA 5.3: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA HIDROSTÁTICO COM CONSTRANGIMENTO DE VOLUME E MATERIAL CELULAR $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}$ COM C.F. DE DIRICHLET. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) $1 \times 1 \times 1$; B) $2 \times 2 \times 2$; C) $3 \times 3 \times 3$; D) $4 \times 4 \times 4$; E) $5 \times 5 \times 5$; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	70
FIGURA 5.4: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA HIDROSTÁTICO COM CONSTRANGIMENTO DE PERMEABILIDADE E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE NEUMANN. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) $1 \times 1 \times 1$; B) $2 \times 2 \times 2$; C) $3 \times 3 \times 3$; D) $4 \times 4 \times 4$; E) $5 \times 5 \times 5$; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	72

FIGURA 5.5: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA HIDROSTÁTICO COM CONSTRANGIMENTO DE PERMEABILIDADE E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) 1×1×1; B) 2×2×2; C) 3×3×3; D) 4×4×4; E) 5×5×5; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	73
FIGURA 5.6: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA HIDROSTÁTICO COM CONSTRANGIMENTO DE PERMEABILIDADE E MATERIAL CELULAR $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}$ COM C.F. DE DIRICHLET. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) 1×1×1; B) 2×2×2; C) 3×3×3; D) 4×4×4; E) 5×5×5; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	74
FIGURA 5.7: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA CORTE3 COM CONSTRANGIMENTO DE VOLUME E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE NEUMANN. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) 1×1×1; B) 2×2×2; C) 3×3×3; D) 4×4×4; E) 5×5×5; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	76
FIGURA 5.8: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA CORTE3 COM CONSTRANGIMENTO DE VOLUME E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) 1×1×1; B) 2×2×2; C) 3×3×3; D) 4×4×4; E) 5×5×5; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	77
FIGURA 5.9: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA CORTE3 COM CONSTRANGIMENTO DE VOLUME E MATERIAL CELULAR $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}$ COM C.F. DE DIRICHLET. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) 1×1×1; B) 2×2×2; C) 3×3×3; D) 4×4×4; E) 5×5×5; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	78
FIGURA 5.10: RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO PARA CASO DE CARGA CORTE3 COM CONSTRANGIMENTO DE PERMEABILIDADE . A) MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE NEUMANN; B) MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET.; C) MATERIAL CELULAR $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}$ COM C.F. DE DIRICHLET.	81
FIGURA 5.11: RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO PARA CASO DE CARGA CORTE2 COM CONSTRANGIMENTO DE VOLUME . A) MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE NEUMANN; B) MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET.; C) MATERIAL CELULAR $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}$ COM C.F. DE DIRICHLET.	82

FIGURA 5.12: RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO PARA CASO DE CARGA

TRIAXIAL COM CONSTRANGIMENTO DE **PERMEABILIDADE**. A) MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE NEUMANN; B) MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET.; C) MATERIAL CELULAR $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}$ COM C.F. DE DIRICHLET..... 83

FIGURA 5.13: RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO PARA CASO DE CARGA

BIAXIAL COM CONSTRANGIMENTO DE **VOLUME** A) MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE NEUMANN; B) MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET.; C) MATERIAL CELULAR $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}$ COM C.F. DE DIRICHLET..... 84

FIGURA 5.14: RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO PARA CASO DE CARGA

UNIAXIAL COM CONSTRANGIMENTO DE **VOLUME**. A) MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE NEUMANN; B) MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET.; C) MATERIAL CELULAR $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}$ COM C.F. DE DIRICHLET..... 85

FIGURA 5.15: POSIÇÃO DAS COLUNAS DE ELEMENTOS A SEREM AVALIADAS NO ESTUDO DA PERIODICIDADE

DA TENSÃO E PARA UM NÚMERO CRESCENTE DE REPETIÇÕES DA CÉLULA DE BASE UNITÁRIA. REPRESENTAÇÃO EM 2D PARA MAIOR SIMPLICIDADE. 86

FIGURA 5.16: TOPOLOGIA OBTIDA E POSIÇÃO DAS COLUNAS DE ELEMENTOS NO PLANO xy EM ESTUDO,

PARA CADA MICROESTRUTURA E TANTO PARA REPETIÇÕES PARES COMO ÍMPARES; A) HIDROSTÁTICO $2 \times 2 \times 2$; B) HIDROSTÁTICO $3 \times 3 \times 3$; C) CORTE3 $2 \times 2 \times 2$; D) CORTE3 $3 \times 3 \times 3$ 87

FIGURA 5.17: LOCALIZAÇÃO DAS COLUNAS DE ELEMENTOS NO PLANO xy MÉDIO DO COMPÓSITO PARA

CASO **HIDROSTÁTICO** E FATOR DE ESCALA PAR E ÍMPAR. A) $2 \times 2 \times 2$; B) $3 \times 3 \times 3$ COM TOPOLOGIA DESCENTRADA. 88

FIGURA 5.18: ANÁLISE DA PERIODICIDADE PARA CASO DE CARGA **HIDROSTÁTICO** COM

CONSTRANGIMENTO DE **VOLUME** E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET. TENSÃO AVALIADA EM CADA ELEMENTO, DAS COLUNAS SELECIONADAS, AO LONGO DO EIXO Y PARA UM FATOR DE ESCALA CRESCENTE: A) $2 \times 2 \times 2$; B) $3 \times 3 \times 3$; C) $4 \times 4 \times 4$; D) $5 \times 5 \times 5$ 89

FIGURA 5.19: DISTRIBUIÇÃO DA TENSÃO EQUIVALENTE (MPa) PARA CASO DE CARGA **HIDROSTÁTICO**

COM CONSTRANGIMENTO DE **VOLUME** E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET. A) $2 \times 2 \times 2$; B) $3 \times 3 \times 3$ 89

FIGURA 5.20: ANÁLISE DA PERIODICIDADE PARA CASO DE CARGA **CORTE3** COM CONSTRANGIMENTO DE

VOLUME E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET. TENSÃO AVALIADA EM CADA ELEMENTO, DAS COLUNAS SELECIONADAS, AO LONGO DO EIXO y PARA UM FATOR DE ESCALA CRESCENTE: A) $2 \times 2 \times 2$; B) $3 \times 3 \times 3$; C) $4 \times 4 \times 4$; D) $5 \times 5 \times 5$ 90

FIGURA 5.21: DISTRIBUIÇÃO DA TENSÃO EQUIVALENTE (MPa) PARA CASO DE CARGA CORTE3 COM CONSTRANGIMENTO DE VOLUME E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET. A) 2×2×2; B) 3×3×3.	90
--	----

ANEXOS

FIGURA A.1: REPRESENTAÇÃO DA CÉLULA DE BASE UNITÁRIA DISCRETIZADA POR UMA MALHA 10×10×10 E RESPECTIVA NUMERAÇÃO DOS ELEMENTOS QUE A CONSTITUEM.	106
FIGURA A.2: REPRESENTAÇÃO DA CÉLULA UNITÁRIA CENTRAL PARA UM FATOR DE ESCALA $N = 3$ E NUMERAÇÃO DOS ELEMENTOS NA PAREDE ESQUERDA (À ESQUERDA) E TRASEIRA (À DIREITA).	108
FIGURA A.3: REPRESENTAÇÃO DA CÉLULA UNITÁRIA CENTRAL PARA UM FATOR DE ESCALA $N = 2$ E NUMERAÇÃO DOS ELEMENTOS NA PAREDE ESQUERDA (À ESQUERDA) E TRASEIRA (À DIREITA).	109
FIGURA A.4: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA CORTE2 COM CONSTRANGIMENTO DE PERMEABILIDADE E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ COM C.F. DE NEUMANN. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) 1×1×1; B) 2×2×2; C) 3×3×3; D) 4×4×4; E) 5×5×5; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	110
FIGURA A.5: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA CORTE2 COM CONSTRANGIMENTO DE PERMEABILIDADE E MATERIAL COMPÓSITO $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ COM C.F. DE DIRICHLET. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) 1×1×1; B) 2×2×2; C) 3×3×3; D) 4×4×4; E) 5×5×5; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	111
FIGURA A.6: ANÁLISE DE EFEITOS DE ESCALA PARA CASO DE CARGA CORTE2 COM CONSTRANGIMENTO DE PERMEABILIDADE E MATERIAL CELULAR $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$ COM C.F. DE DIRICHLET. DESVIO CALCULADO PELA EQ. (5.2) EM TODOS OS ELEMENTOS DA CÉLULA CENTRAL UNITÁRIA PARA DIFERENTES FATORES DE ESCALA: A) 1×1×1; B) 2×2×2; C) 3×3×3; D) 4×4×4; E) 5×5×5; F) RESUMO ESTATÍSTICO EM TERMOS DE MÉDIA E DESVIO PADRÃO.	112

Simbologia e notações

Latim

\mathcal{A}	Parâmetro adimensional que quantifica a anisotropia de material.
\mathbf{C}^H, C_{ijkl}^H	Tensor da flexibilidade homogeneizado.
D	Dimensão característica do domínio macroscópico.
d	Dimensão característica do domínio microscópico.
E^0	Módulo de elasticidade do material base da microestrutura.
E_{ijkl}^0	Tensor da elasticidade ou rigidez do material base da microestrutura.
E_{ijkl}	Tensor da elasticidade ou rigidez.
\mathbf{E}^H, E_{ijkl}^H	Tensor da elasticidade ou rigidez homogeneizado.
E_{Mat1}	Módulo de elasticidade do material 1 (sólido).
E_{Mat2}	Módulo de elasticidade do material 2 (vazio).
\bar{e}	Média.
f	Função objetivo.
F_n	Força aplicada em um nó.
G	Módulo de corte do material
g_i	Função agregadora.
\hat{H}	Operador de convulsão utilizado no filtro de sensibilidades.
k^*	Limite superior para a fração de permeabilidade do material.
\mathbf{K}, K_{ij}	Matriz de permeabilidade.
\mathbf{K}^H, K_{ij}^H	Matriz de permeabilidade homogeneizada.
\mathbf{n}	Normal à superfície.
n	Fator de escala.
N	Número de elementos que compõem a malha.
N_n	Número de elementos a que pertence o nó.
p	Expoente de penalização do modelo SIMP.
R_{ij}	Matriz de rotação

r_{min}	Raio do filtro de sensibilidades.
s	Desvio padrão.
U_{dil}	Densidade energia de dilatação.
U_{dis}	Densidade energia de distorção.
U_e	Densidade energia de deformação.
V^*	Limite superior para a fração volúmica de material disponível.
W	Trabalho por unidade de volume.
Y	Domínio microscópico.

Grego

α	Coeficiente de penalização.
β	Constante arbitrária.
γ	Distorção.
δ_{ij}	Delta de Kronecker.
$\boldsymbol{\varepsilon}, \varepsilon_{ij}$	Tensor das extensões.
ε_{rs}^0	Campo de deslocamento macroscópico médio.
η	Fator de penalização associado à tensão.
θ_i	Ângulos de Euler.
λ	Primeira constante de Lamé.
μ	Função densidade microscópica.
ν	Coeficiente de Poisson do material.
ρ	Função densidade macroscópica.
$\boldsymbol{\sigma}, \sigma_{ij}$	Tensor das tensões.
τ	Tensão de corte.
ϕ	Função de relaxamento.
χ_i	Modos de deformação locais da célula.
Ψ	Domínio macroscópico.
ψ	Função arbitrária.

Operadores

⟨.⟩ Simbologia que se refere à média.

Abreviaturas

APDL	Ansys Parametric Design Language
MMA	Method of Moving Asymptotes
MTS	Machine Testing System
PCL	Polycaprolactone
SIMP	Solid Isotropic Material with Penalisation

1 Introdução

O termo Engenharia está relacionado com a criação de produtos úteis que atravessam um processo que se estende desde a sua concepção até à produção, passando por etapas de projeto conceptual, análises, planeamento, produção e controle de qualidade.

A análise e otimização de estruturas e materiais têm ocupado, ao longo dos anos, um espaço considerável ao nível de investigação científica, sendo que é uma área em contínuo desenvolvimento, por ter uma vasta gama de aplicações e utilidade em projetos de engenharia.

Tipicamente, num projeto de engenharia deste tipo, realiza-se uma análise estrutural que procura determinar a resposta de uma estrutura e seus componentes a um carregamento exterior (por exemplo, através da leitura de deformações e/ou tensões). Isto aplica-se a todas as estruturas que devam resistir a carregamentos mecânicos (*e.g.*, pontes, máquinas, próteses ou tecidos biológicos). Posteriormente, os resultados são utilizados para validar a aptidão da estrutura, tendo em conta os requisitos de projeto. Para tal pode-se recorrer a métodos de análise analíticos, numéricos e/ou experimentais, sendo estes últimos mais difíceis de executar na maior parte das vezes, por terem condicionantes como condições de trabalho, experiência do investigador, complexidade do objeto de estudo ou custos financeiros.

Os métodos analíticos baseiam-se na descrição analítica dos fenómenos físicos, através de modelos matemáticos, e em formulações teóricas pelo que apresentam maior exatidão, ao nível de resultados. Um modelo matemático é uma representação ou interpretação simplificada da realidade e pode ser definido como um conjunto de equações que governam o comportamento do sistema físico, relacionando as variáveis e os parâmetros que o descrevem. A resolução de um problema a partir de um modelo matemático depende da complexidade do sistema de equações que lhe está associado. Assim, se para modelos simples a resolução

Introdução

analítica é fácil de obter, o mesmo não sucede para modelos com equações diferenciais e integrais definidas em domínios de geometria complexa.

A utilização de computadores tem vindo, ao longo das últimas décadas, a impulsionar o desenvolvimento e utilização de modelos numéricos. A isso chama-se simulação numérica que é bastante utilizada na área da mecânica computacional. Os métodos numéricos facilitam a resolução de problemas mais complexos, são eficientes e aproximados da realidade. Entre estes destaca-se o método dos elementos finitos (MEF) que é um método variacional. No MEF um domínio é decomposto em vários subdomínios que permitem simplificar a formulação do problema, pois é mais fácil representar uma função complexa como uma composição de funções polinomiais simples, com um erro tão pequeno quanto se pretenda, bastando para isso aumentar o número de subdomínios. Por outras palavras, uma estrutura é vista como a assemblagem de elementos discretos (ou finitos) e a resposta da estrutura, como um todo, é aproximada pela resposta individual de cada elemento, por exemplo ao nível da distribuição de deslocamentos. O MEF representa uma ferramenta capaz de analisar problemas reais de engenharia, envolvendo geometrias, comportamentos físicos ou condições de fronteira complexas. Posto isto, só a utilização de computadores permite explorar todas as potencialidades do método, já que este implica sempre um custo computacional elevado. Não obstante, uma maior capacidade computacional permite uma discretização por elementos finitos mais refinada de um problema, permitindo uma solução mais aproximada da realidade. Pretende-se com esta explicação, realçar a importância que os computadores e a simulação numérica têm tido ao longo das últimas décadas, e também na realização desta dissertação.

Em matemática, otimização é a seleção da melhor alternativa de um conjunto de possibilidades. Na sua forma mais básica, um problema de otimização consiste na maximização ou minimização de uma função de variáveis contínuas ou discretas, visando encontrar uma solução ótima, isto é, que resulte no melhor desempenho possível do sistema, seguindo um critério de desempenho ou performance. Quando aplicada a problemas de engenharia e, mais especificamente a projeto estrutural, a otimização pode-se traduzir num problema clássico de minimização de massa de uma estrutura (função objetivo), com constrangimentos de tensões ou deslocamentos. Em suma, a otimização estrutural é uma disciplina que engloba um conjunto de teorias e métodos que procuram obter a estrutura que desempenha mais eficientemente a função pretendida.

Esta dissertação, desenvolve a análise e otimização de materiais compósitos, mais especificamente construídos num polímero chamado de PCL (*polycaprolactone*). Este compósito tem recebido bastante atenção ultimamente, em aplicações ao corpo humano, tendo esta sido, inclusive, aprovada pelo FDA (*U.S Food and Drug Administration*). Como

consequência, a sua aplicação no fabrico de *scaffolds* (suportes biomiméticos) em engenharia de tecidos, tem sido bastante utilizada.

Nesta dissertação são considerados os materiais compósitos de microestrutura periódica. Neste tipo de materiais há uma célula de base unitária que é repetida periodicamente em todas as direções espaciais, gerando a heterogeneidade do meio. Esta célula de base unitária representa a mais pequena heterogeneidade do domínio do material e a sua topologia é tida como objeto de estudo, na análise das propriedades mecânicas, mas também da sua eficiência para uma medida de desempenho pretendida para o material e restrições funcionais de projeto.

Quando se pretende estudar o comportamento mecânico de um meio periódico heterogéneo, a utilização de métodos analíticos ou numéricos é apenas plausível para um número pequeno de heterogeneidades. Para um número grande de heterogeneidades é comum a utilização de teorias simplificadoras, como a teoria da homogeneização que permite o cálculo das propriedades mecânicas equivalentes. Segundo a teoria da homogeneização, um meio heterogéneo é substituído por um meio homogéneo com propriedades elásticas equivalentes. A utilização desta teoria permite realizar análises numéricas complexas com menores gastos computacionais. No entanto, como resultado das simplificações assumidas, é necessário realizar-se testes que permitam avaliar a aproximação da teoria à realidade. Isso é feito no âmbito desta dissertação aquando do estudo dos efeitos de escala.

1.1 Objetivos da dissertação

A presente dissertação de mestrado tem como principal objetivo acrescentar valor científico à investigação que incide no projeto e análise de materiais de microestrutura periódica compósitas (duas fases sólidas) e porosas (fases sólido/vazio, i.e., material celular), com especial ênfase no estudo dos efeitos de escala na distribuição de tensões. Com menor ênfase foi feito um estudo bibliográfico sobre a aplicação de critérios de tensão na otimização topológica de estruturas. Desde que a otimização topológica foi introduzida por Bendsøe e Kikuchi (1988), tem sido frequente a sua utilização em problemas de maximização de rigidez, ou de minimização da flexibilidade. No entanto, esse pode não ser o objetivo na maioria dos casos práticos de projeto estrutural, pelo que algumas alternativas têm sido propostas, como minimização de massa ou volume, com constrangimentos de tensão. A introdução de critérios de tensão é, portanto, um tópico relativamente recente e este trabalho, representa um ponto de interesse por opor efeitos de escala a distribuição de tensões ao nível da microestrutura, para além de se focar na determinação de campos de tensão na célula de base unitária, pela teoria da

Introdução

homogeneização. Uma das principais aplicações que serve de inspiração à realização desta dissertação é o projeto de suportes biomiméticos. para regeneração de tecido ósseo – *scaffolds*.

De forma a iniciar o contacto com as temáticas centrais da dissertação, foi utilizado um código de otimização topológica desenvolvido em Matlab, por Sigmund (2001). Esse código permitiu a realização de otimizações de estruturas em domínios bidimensionais e obtenção de diferentes topologias, consoante as condições de fronteira definidas. Para além disso, introduziu o conceito de filtro de sensibilidades que é uma ferramenta necessária em otimização topológica para evitar problemas numéricos (*checkerboard*). De seguida foi utilizado um código FORTRAN com principal ênfase num algoritmo que permite aplicar o método das diferenças finitas na resolução do problema de otimização topológica.

Como explicado anteriormente, um dos focos desta dissertação é a determinação de campos de tensão em microestruturas de materiais compósitos através da teoria da homogeneização, sendo para isso necessário realizar-se a validação desses resultados. Para isso são efetuados ensaios numéricos, através de códigos APDL, para diferentes topologias de célula de base. De seguida são avaliadas as tensões provocadas por carregamentos, de tensão constante ou deformação constante, em compósitos com diferentes números de repetições da célula de base ou microestrutura representativa (desde $1 \times 1 \times 1$ até $5 \times 5 \times 5$). Em repetições pares, para que as topologias correspondam, será utilizado um padrão periódico *shifted* (descentrado ou em *offset*) que será posteriormente detalhado. Pretende-se comprovar que quanto maior o número de repetições melhores serão os resultados obtidos, isto é, menor será o desvio entre os resultados obtidos pelo ensaio numérico ao compósito e o respectivo resultado fornecido pela teoria da homogeneização. Este é o estudo dos efeitos de escala para distribuição de tensões e será feito através de ensaios numéricos (com códigos APDL). É feita uma seleção criteriosa das topologias a estudar, dos carregamentos utilizados (tensão constante ou deformação constante) e das componentes da tensão a ler, para que se possa um conjunto de resultados o mais representativo possível. Pretende-se verificar, também, se há um padrão periódico na distribuição de tensões, ao nível do compósito gerado para um número crescente de repetições da célula de base.

1.2 Estrutura da dissertação

A dissertação está estruturada em 6 capítulos, desde a “introdução” (capítulo atual) até à “conclusão e desenvolvimentos futuros”, como mostra a figura 1.1. Na mesma podem-se distinguir três blocos principais, diferentes: a) investigação e revisão literária, com ênfase no

problema de otimização com critérios de tensão b) metodologias e técnicas de otimização e c) análise e resultados.

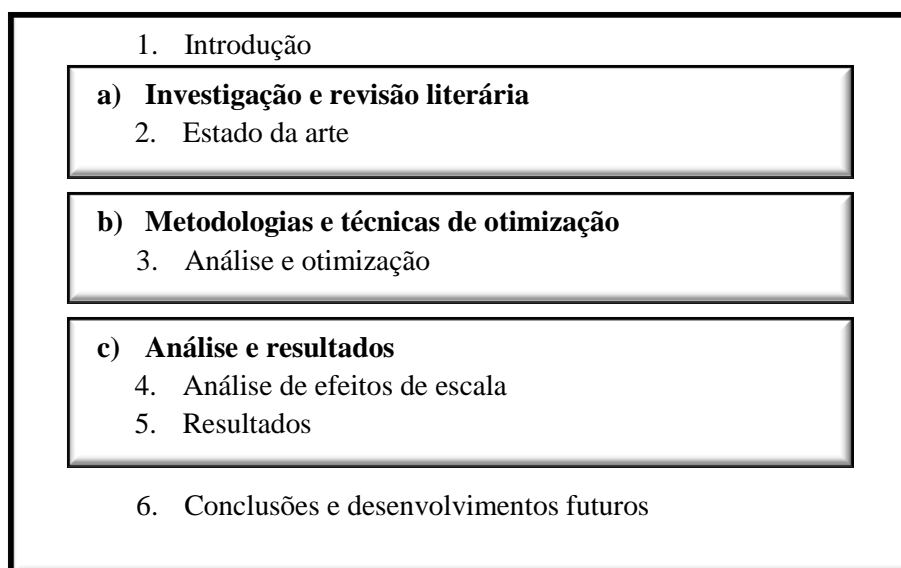


Figura 1.1: Estrutura da dissertação

O capítulo 1 pretende introduzir o tema da dissertação, abordando as várias temáticas teórico-práticas que envolveram o desenvolvimento da mesma. São também descritas as motivações que levaram à sua realização e expostos os objetivos.

O capítulo 2 apresenta o estado da arte. Esta possui uma revisão bibliográfica, sobre a investigação científica, no âmbito da dissertação. São abordados os desenvolvimentos feitos ao nível de otimização estrutural, otimização topológica, materiais de microestrutura periódica e na utilização do polímero PCL. O foco deste capítulo está, no entanto, nos efeitos de escala e na otimização de topologia com critérios de tensão. Este capítulo tem como objetivo expor os principais trabalhos em que a dissertação se baseia e realçar a sua originalidade científica.

No capítulo 3 são expostos os processos e metodologias utilizados na análise e otimização que originam os resultados apresentados no capítulo 5. Este capítulo é, assim, de cariz teórico. É feita também uma revisão teórica de alguns tópicos relevantes durante a realização da dissertação.

No capítulo 4 é feita uma caracterização dos ensaios numéricos e são explicadas as condições de fronteira, utilizadas nos mesmos. Para além disso, todo o processo de análise que foi feito é exposto.

O capítulo 5 apresenta os resultados obtidos, tanto a nível de otimização como a nível de análise. Para que a leitura dos resultados seja o mais clara possível, este capítulo foi dividido em

Introdução

duas partes. A primeira mostra as topologias ótimas obtidas para diferentes estados de tensão, assim como para diferentes formulações do problema de otimização. Na segunda metade, são apresentados os resultados obtidos relativamente à influência dos efeitos de escala, tanto na distribuição de tensões e respetiva validação pela teoria da homogeneização como na determinação de um padrão periódico na distribuição da tensão, em microestruturas periódicas.

Finalmente, o capítulo 6 tem as conclusões, onde é feita uma retrospectiva de todo o trabalho realizado e são discutidos os resultados obtidos, face ao que era previsto. Por fim, são lançados desafios futuros que pretendem dar continuidade ao trabalho de investigação aqui apresentado.

2 Estado da arte

Os primeiros desenvolvimentos, relacionados com a pesquisa de formas ótimas de elementos estruturais, remontam aos séculos XVI e XVII através de Galileo Galilei. A área da otimização estrutural tem constituído, mais recentemente, um tópico de interesse, projetada pelo avanço tecnológico que tem sido feito ao nível de computadores e na área de Engenharia Assistida por Computador.

Têm sido, também, desenvolvidos métodos analíticos e numéricos para a resolução deste tipo de problemas. A teoria dos Elementos Finitos (Clough, 1960) surgiu no seguimento dos avanços teóricos feitos na área dos métodos numéricos aplicados à mecânica estrutural e permitiu pela primeira vez a possibilidade de se realizarem análises de estruturas complexas.

2.1 Otimização estrutural

A otimização estrutural visa a obtenção de uma configuração ótima, através da determinação de um conjunto de parâmetros, designados variáveis de projeto, que satisfaçam a minimização/maximização de uma função objetivo (massa, rigidez, flexibilidade), quando sujeita a um conjunto de constrangimentos. Esta pode se dividir em três categorias principais: otimização dimensional, otimização de forma e otimização topológica. Pode ser, ainda, considerada a otimização à escala do material, isto é, determinação do material ótimo.

A otimização dimensional estava bem patente em problemas de otimização estrutural, no início do período da otimização estrutural moderna (década de 60). Neste tipo de otimização, as

dimensões das secções transversais dos elementos da estrutura são, por exemplo, as variáveis de projeto, sendo que a forma ou topologia da mesma não se alteram.

Como resultado de um esforço de investigação, começam a surgir os primeiros trabalhos que introduzem a otimização de forma (Zienkiewicz e Capbell, 1973; Haftka e Grandhi, 1986). Em otimização de forma, as dimensões e topologia da estrutura estão pré-definidas e a fronteira Γ que delimita um domínio Ω é variável. Desse modo, as variáveis de projeto são as coordenadas de posição dos pontos que definem a fronteira do problema. O objetivo é, portanto, encontrar a forma ótima da fronteira Γ que minimiza a função objetivo do problema. Na otimização de forma, as variáveis de projeto são designadas variáveis geométricas.

Este tipo de otimização, apesar de ser mais complexa que otimização dimensional, depende fortemente da topologia o que pode conduzir a uma solução sub-ótima. Isto é, se a topologia definida não for ótima. As duas categorias de otimização estrutural apresentadas podem ser utilizadas individualmente, porém, é quando utilizadas em conjunto que se obtêm os melhores resultados.

A otimização de topologia tem como objetivo distribuir material numa determinada região, da forma mais eficiente, de modo a maximizar ou minimizar uma função objetivo, sem violar um conjunto de constrangimentos. Esta lida com variáveis booleanas (0 ou 1) que representam um estado de existência (1) ou ausência (0) de material. Estes vários tipos de otimização estrutural estão ilustrados na figura 2.1.

A otimização topológica pode ser aplicada a estruturas reticuladas, para descobrir quais os nós e as barras que correspondem à utilização mais eficiente do material (*Ground Structure Approach*) e também a meios contínuos bidimensionais ou tridimensionais, para identificar respetivamente pontos do plano ou do espaço, com material ou ausência dele.

No caso de otimização topológica aplicada a meios contínuos, discretizados por uma malha de N elementos finitos, é associada tipicamente uma variável contínua de densidade $\rho_e \in [0,1]$ a cada elemento, que representa a sua densidade relativa, onde $e = 1, \dots, N$. A solução é apresentada sob a forma de presença ($\rho_e = 1$) ou ausência ($\rho_e = 0$) de material no domínio. Existem vários métodos para resolver um problema de otimização topológica, como o *Hard-Kill Optimization* ou *Fully Stressed Design Technique* e ainda o *Soft-Kill Optimization* que é uma variante do primeiro. Bendsøe e Kikuchi (1988) desenvolveram um método importante em otimização topológica, baseado na utilização de um modelo de material compósito, designado método de homogeneização. Em Sigmund (1994) é apresentado uma variante designada método da homogeneização inversa (ver capítulo 3).

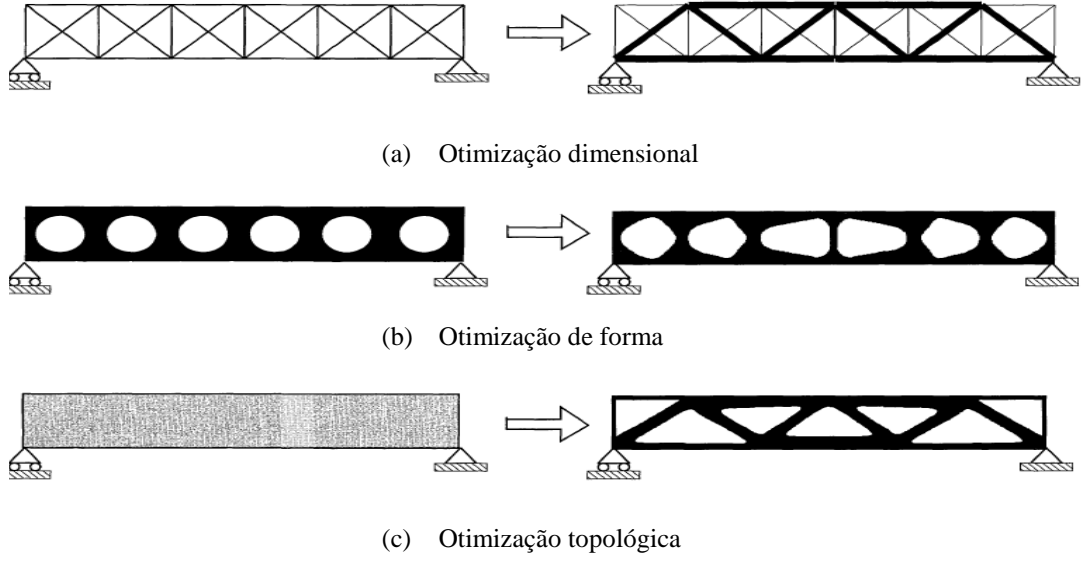


Figura 2.1: Tipos de otimização estrutural. (a) Otimização dimensional; (b) otimização de forma; (c) otimização topológica. O problema inicial está representado à esquerda e a estrutura otimizada à direita.

Adaptado de Sigmund (2000).

Outro método baseado num modelo de material compósito de densidade variável é o SIMP (*Solid Isotropic Material with Penalization*), proposto por Bendsøe (1989) e introduzido por Rozvany *et al* (1992). Este método utiliza um expoente designado expoente de penalização que penaliza densidades intermédias ($0 < \rho < 1$), forçando o algoritmo a convergir para $\rho = 1$ (presença de material) ou $\rho = 0$ (ausência de material). As propriedades, E_e , do material em cada elemento podem ser expressas em função da densidade por:

$$E_e = \rho_e^p E_0 \quad (2.1)$$

em que E_0 é o módulo de Young do material de base (sólido e isotrópico) e p a penalização. A figura 2.2 mostra a relação entre a rigidez relativa $\frac{E_e}{E_0}$ e a densidade ρ_e para várias penalizações.

Segundo Bendsøe & Sigmund (2003), para um problema com um constrangimento de volume ativo, $p \geq 3$ é necessário para uma convergência da variável de densidade ρ , de modo a que o domínio de projeto seja caracterizado apenas por regiões de $\rho = 1$ (material sólido) e $\rho = 0$ (vazio).

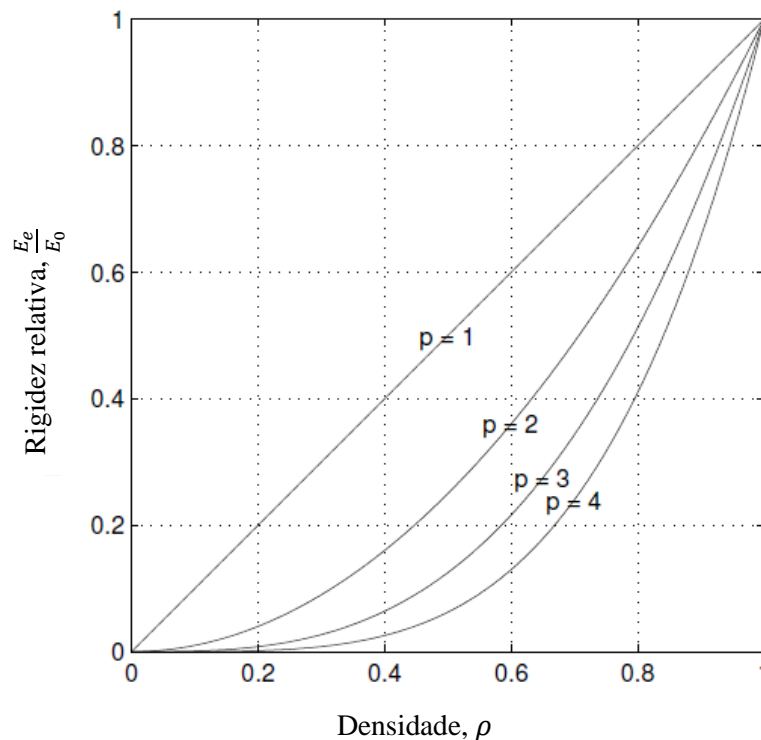


Figura 2.2: Rigidez relativa em função da densidade para vários valores de penalização, p . Adaptado de Lee (2012).

2.2 Materiais compósitos de microestrutura periódica e efeitos de escala

Os materiais compósitos pertencem a uma classe de materiais que é formada por dois ou mais constituintes (fases) diferentes. Como se trata de um tipo de material onde é possível obterem-se características únicas, têm bastante aplicação – desde artigos utilizados no dia-a-dia até produtos de alta tecnologia. Pode ser um material fabricado pelo Homem, mas também existem alguns exemplos de compósitos na natureza, como a madeira, a cortiça e o osso humano.

Nesta dissertação é considerado um material compósito poroso e de microestrutura periódica, feito a partir de um polímero, PCL (polycaprolactone). Este compósito é um poliéster biodegradável (biomaterial) e a sua utilização como implante tem recebido bastante atenção, por possuir propriedades que promovem a sua compatibilidade biológica. Mais especificamente, é utilizado no projeto de *scaffolds* para correção de defeitos do tecido ósseo.

Do ponto de vista de projeto, os requisitos biológicos e mecânicos para um *scaffold* entram em conflito, pois a melhoria duma função deteriora a outra. Pretende-se que o *scaffold* seja ao mesmo tempo poroso (de modo a favorecer o intracrescimento ósseo e cumprir a sua função biológica) e rígido (de modo a cumprir a função mecânica). Aqui as técnicas de otimização desempenham um papel importante para se encontrar um compromisso ótimo entre rigidez e permeabilidade do meio e as arquiteturas ótimas para *scaffolds* podem ser obtidas através de otimização topológica. Neste sentido, recentemente têm sido conduzidos alguns estudos (Wieding *et al.* 2013, 2014; Wu *et al.* 2014). Em Kang *et al.* (2010), o módulo volumétrico e a difusividade isotrópica são utilizados como medida verificadora dos requisitos funcionais, concluindo que as microestruturas obtidas satisfaziam o objetivo, para porosidades entre os 30% e 60%.

O PCL tem sido, como referido anteriormente neste capítulo, alvo de estudos que pretendem averiguar a sua adequabilidade no fabrico dos ditos *scaffolds*, quanto às suas propriedades mecânicas (Eshraghi & Das 2010, 2012) e aos métodos de fabrico em si (Williams *et al.* 2005; Coelho *et al.* 2015). Em Coelho *et al.* (2015) foi desenvolvido um estudo onde, através da realização de vários ensaios em diferentes amostras de PCL (ver figura 2.3), se determinou um módulo de Young $E \approx 300\text{MPa}$ para o PCL.

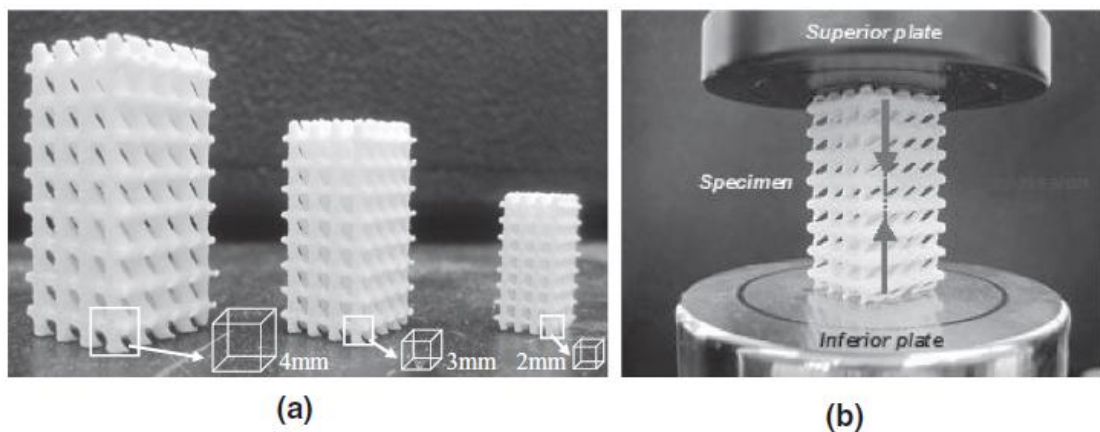


Figura 2.3: (a) Amostras de PCL de diferentes tamanhos e identificação da célula unitária. (b) Teste de compressão na máquina MTS (Mechanical Testing System). Adaptado de Coelho *et al.* (2015).

O estudo dos efeitos de escala é uma parte importante para validar os resultados obtidos pela teoria da homogeneização, isto é, estuda-se a convergência das propriedades do material compósito, para os valores previstos por aquela teoria. De fato, as propriedades estimadas pela teoria da homogeneização consideram uma repetição infinita de células unitárias e condições de fronteira periódicas, o que não se verifica exatamente na prática. O projeto de material periódico

pelo método da homogeneização apoia-se nas duas premissas anteriores, mas, na realidade, quando o material é fabricado a sua célula de base deve ter uma dimensão. Assim, é necessário averiguar se as topologias da microestrutura obtidas pelo método da homogeneização podem traduzir-se numa estrutura real, à escala macroscópica. Em Xie *et al* (2012) esse tópico é abordado, opondo o projeto de estruturas periódicas (com repetição finita das células unitárias) ao projeto de material periódico (em que a dimensão da célula unitária é infinitesimal e, portanto, temos infinitas células). Com o aumento de células unitárias as topologias encontradas à escala da estrutura devem ter propriedades cada vez mais próximas das homogeneizadas.

Esta dissertação é uma mais-valia, na análise dos efeitos de escala com critérios de tensão, e surge no seguimento de um trabalho similar, ao nível dos efeitos de escala, mas que coloca em foco as constantes elásticas, como caracterização mecânica do material, ver Coelho *et al* (2015) e Amiano (2015). Efetivamente, a análise dos efeitos de escala é um tópico frequentemente associado ao projeto de materiais compósitos de microestrutura periódica (Zhang & Sun, 2006). Por exemplo, em Pecullan *et al* (1999) são avaliadas as propriedades estimadas de compósitos elásticos 2D. Para isso, fez-se aumentar o fator de escala (definido como o rácio entre o comprimento linear do compósito e o da célula unitária) dos compósitos, quando sujeitos a ensaios numéricos com condições de fronteira de Dirichlet e Neumann (ver capítulo 4).

2.3 Problema de otimização com critérios de tensão

A otimização topológica enquanto método de distribuição ótima de material, num determinado domínio de projeto, representa um campo de investigação bem estabelecido. Porém, a maioria das contribuições científicas nesta matéria não têm contemplado critérios de tensão.

A introdução de critérios de tensão num problema de otimização topológica pode ser feita através da função objetivo ou, como é mais comum, dos constrangimentos. Um problema típico de otimização topológica é o da maximização de rigidez, ou de minimização da flexibilidade (*compliance*) com constrangimento de volume. No entanto, esse pode não ser o interesse na maioria dos casos práticos de projeto estrutural, pelo que algumas alternativas têm sido propostas, como, por exemplo, a formulação de problemas de minimização de massa ou volume, com constrangimentos de tensão. Numa primeira análise, esta abordagem foge aos critérios pouco objetivos, associados a problemas de maximização de rigidez, mas requerem mais esforço computacional pelo que têm sido também exploradas técnicas que aliviem esse peso, como o uso de computação em paralelo (París *et al*, 2013). Para além disso, a utilização

de critérios de tensão opõe o investigador a três grandes desafios. São eles a natureza local do constrangimento, o comportamento altamente não-linear das tensões (Yang & Chen, 1996; Le *et al*, 2010) e o fenómeno da singularidade. O fato da tensão representar uma quantidade local, ao contrário da rigidez, pode implicar a utilização de um grande número de constrangimentos.

Fruto dos primeiros desenvolvimentos neste tópico, na última década, tem havido uma maior preocupação em tratar problemas de otimização estrutural com critérios de tensão, como em Lipton & Stuebner (2006). Estes investigadores utilizaram uma extensão das metodologias empregues, até então, e conseguiram controlar as flutuações locais da tensão à escala da microestrutura, para um estado de tensão imposto à escala da macroestrutura. As microgeometrias obtidas garantiram a rigidez global da estrutura, ao mesmo tempo que evitaram a concentração de tensões, em cantos reentrantes (ver figura 2.4).

Em Verbart *et al*, (2013) é utilizado um método similar ao SIMP, penalizando o material no qual os valores da tensão excedem um valor admissível.

Outros estudos relativamente a este assunto podem ser consultados (Colominas, 2003; Lin & Huang, 2004; Pereira *et al*, 2004; Amstutz & Novotny, 2010; Emmendoerfer & Fancello, 2014; Guo *et al*, 2014).

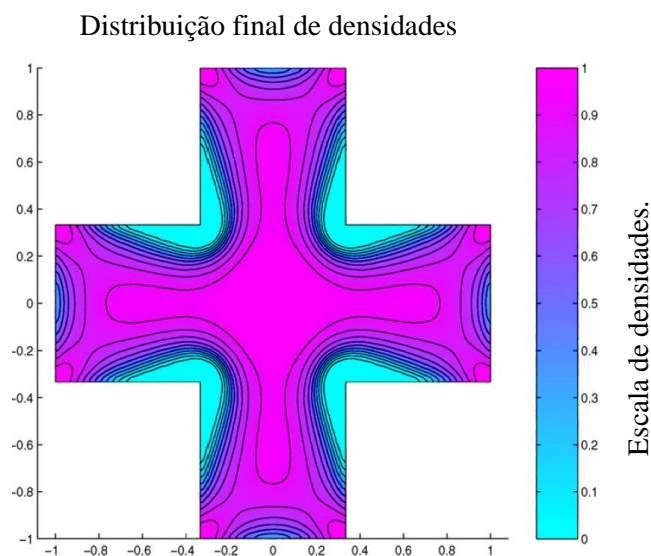


Figura 2.4: Distribuição de densidade de material na secção transversal, otimizada para rigidez torsional.

Adaptado de Lipton & Stuebner (2006).

2.3.1 ϵ -relaxation

O fenómeno da singularidade foi observado pela primeira vez por Sved e Ginos (1968) e Kirsch (1990) num problema de otimização topológica de treliças, sujeito a constrangimentos de tensão. Eles verificaram que a topologia ótima só pode ser obtida removendo por completo

uma das barras da treliça e, portanto, violando o constrangimento de tensão a ela associado. A singularidade deveu-se ao aparecimento de regiões degeneradas como consequência da natureza descontínua do constrangimento de tensão, quando a área da secção transversal é zero. O constrangimento é violado quando essa área tende para zero, mas é removido quando é exatamente zero que é onde, normalmente, o ótimo global se encontra. Contudo os otimizadores não são capazes de identificar estas regiões degeneradas, logo, convergem para um ótimo local. Estas regiões degeneradas podem ser eliminadas introduzindo um relaxamento nos constrangimentos de tensão.

Cheng & Guo (1997) apresentaram um método de relaxamento para o problema de otimização topológica de treliças, designado *ε -relaxed approach*, que permite suavizar a região admissível e tensões maiores em regiões de densidade baixa. Para garantir que o constrangimento de tensão é sempre satisfeito quando a área (ou densidade, em otimização topológica) é zero, este pode ser expresso por:

$$\left(\frac{\sigma_{vm}}{\sigma_y} - 1 \right) \rho_e \leq 0 \quad (2.2)$$

em que σ_{vm} representa o valor da tensão equivalente de von Mises, lido num elemento barra, e σ_y o valor da tensão de cedência (que não pode ser ultrapassado). Verifica-se que quando o valor da densidade se aproxima de zero o constrangimento é violado, pois σ_{vm} aumenta. O método de relaxamento propõe a introdução de um parâmetro, $\varepsilon > 0$, que perturbe o constrangimento de tensão e as variáveis dos limites inferiores, de modo a que a região degenerada no domínio admissível seja suavizada. A introdução do parâmetro ε traduz-se, alterando a Eq. (2.2) para:

$$\left(\frac{\sigma_{vm}}{\sigma_y} - 1 \right) \rho_e \leq \varepsilon \quad (2.3)$$

o que permite que o constrangimento seja satisfeito quando ρ_e é suficientemente pequeno, logo suavizando as fronteiras da região degenerada.

O contorno do domínio admissível e da função objetivo de um problema de treliça composta por três barras pode ser visto na figura 2.5 (ver também Lee (2012) para mais detalhes sobre o problema). Neste exemplo existe um ótimo global no ponto *B*, mas que está na região degenerada *BC*, logo o otimizador tem dificuldade em encontrá-lo e, por norma, converge para o mínimo local *A*. Relaxando os constrangimentos de tensão a região degenerada desaparece e o ponto ótimo *B* passa a estar incluído na região admissível.

Esse mesmo método é aplicado por Duysinx & Bendsøe (1998) para estruturas contínuas. Estas abordagens não são únicas, já que outros autores adoptaram variantes do método (Duysinx & Sigmund, 1998; Pereira *et al*, 2004; Guilherme & Fonseca, 2007; Bruggi & Venini, 2008; París *et al*, 2009).

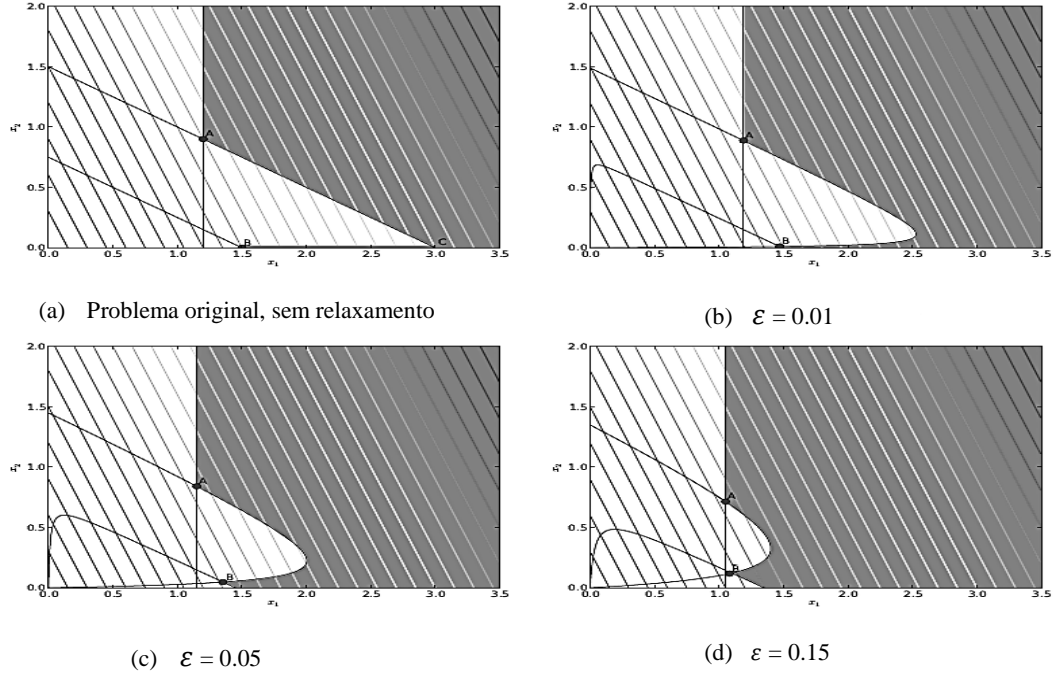


Figura 2.5: Região admissível num problema de treliça composta por três barras. Quanto menor for a perturbação ε mais perto estará o ponto B do verdadeiro ótimo. Adaptado de Lee (2012).

O problema da singularidade é revisitado em Le *et al*, (2010) que propõe uma abordagem mais geral e redefine o constrangimento de tensão. Este é reformulado como

$$\eta(\rho_e)\sigma_{vm} \leq \sigma_y \quad (2.4)$$

$$\eta(\rho_e) = \frac{\rho_e}{\varepsilon + \rho_e} \quad (2.5)$$

em que $\eta(\rho_e)$ é o fator de penalização associado à tensão, semelhante à forma como o método SIMP penaliza a rigidez, através de ρ^p . Esta abordagem garante um domínio de projeto suave desde que $\eta(\rho_e)$ seja monotonamente crescente com $\eta(0) = 0$, tal que a tensão no vazio seja zero e $\eta(1) = 1$, para que a tensão relaxada seja consistente com a tensão nas regiões de material sólido. Para além disso, existe uma restrição em $\eta(\rho_e)$, tal que $\rho^p < \eta(\rho_e) < 1$ para $0 < \rho < 1$, o que implica que o valor interpolado da tensão está delimitado em cima pelo valor

não penalizado da tensão e em baixo pelo valor penalizado da tensão, pelo SIMP. Nenhum desses valores é adequado como constrangimento. Se $\eta(\rho_e) = \rho^p$ então a tensão deixa de ser dependente das densidades nos elementos e o otimizador remove todo o material para minimizar a massa, resultando numa topologia de vazio. Se $\eta(\rho_e) = 1$ obtêm-se tensões diferentes de zero em regiões de densidade nula e o otimizador terá dificuldades em eliminar material nalgumas zonas do domínio de projeto.

2.3.2 qp -approach

Bruggi (2008) introduziu um método de relaxamento alternativo conhecido como qp -approach. Com base num material compósito laminado poroso, a definição de comportamento das tensões microscópicas num problema de otimização topológica baseado na densidade, deve contemplar duas condições: (i) ser inversamente proporcionais à variável de densidade e (ii) convergir para uma tensão finita quando a densidade tende para zero. A definição da tensão microscópica que satisfaz a primeira condição é:

$$\sigma_e = \frac{\langle \sigma_e \rangle}{\rho_e^q} = \rho_e^{p-q} C_e(E_0) \langle \epsilon_e \rangle \quad (2.6)$$

Por sua vez, a condição (ii) é satisfeita escolhendo $q = p$, já que deste modo a tensão microscópica é finita (assumindo tensões macroscópicas finitas).

No qp -approach, quando $q < p$ a tensão na Eq. (2.6) será zero quando a variável de densidade é, igualmente, zero:

$$\lim_{\rho_e \rightarrow 0} \rho_e^{p-q} C_e(E_0) \langle \epsilon_e \rangle = 0, \quad q < p \quad (2.7)$$

Assim, o conjunto de constrangimentos de tensão original pode ser substituído pelo seguinte conjunto relaxado:

$$\tilde{g}_j = \frac{\rho_j^{\varepsilon_{qp}} |\sigma_j|}{\sigma_{lim}} - 1 \leq 0, \quad \text{onde } \varepsilon_{qp} = p - q > 0, \quad \forall j \in \Omega^d \quad (2.8)$$

Ao contrário do conjunto de constrangimentos original que eram apenas aplicados ao domínio do material Ω_{mat}^d , o novo conjunto de constrangimentos relaxado é aplicado a todo o domínio de projeto Ω^d . O parâmetro de relaxação ε_{qp} é análogo ao parâmetro utilizado no ε -relaxation. Aplicando o qp -approach a um problema de treliça formada por duas barras, as

densidades da Eq. (2.8) são substituídas pelas áreas normalizadas das secções transversais das barras, ou seja, $\frac{A_i}{A_{max}}$. A figura 2.6 mostra como o domínio de projeto se altera, para diferentes valores do parâmetro de relaxamento. Como se pode também ver pela figura, o qp -approach tem um efeito no domínio admissível semelhante ao do ε -relaxation. Conforme o parâmetro de relaxamento decresce, o domínio de projeto aproxima-se cada vez mais da sua forma original. No entanto, o qp -approach não converge totalmente para o domínio original quando $\varepsilon_{qp} \rightarrow 0$. Por sua vez, quando $\varepsilon_{qp} = 0$ o ótimo global não faz parte do domínio admissível, ou seja, o segmento $D - F$ não é admissível. Logo, o qp -approach não é adequado quando o parâmetro ε_{qp} decresce continuamente para zero. Contudo, quando o parâmetro toma valores muito pequenos, diferentes de zero, o domínio admissível perturbado aproxima-se do domínio original não perturbado. Além disso, em problemas de otimização topológica baseados em densidade o qp -approach é geralmente aplicado com um parâmetro de relaxamento elevado, tipicamente $\varepsilon_{qp} = 0.5$ ou 1 .

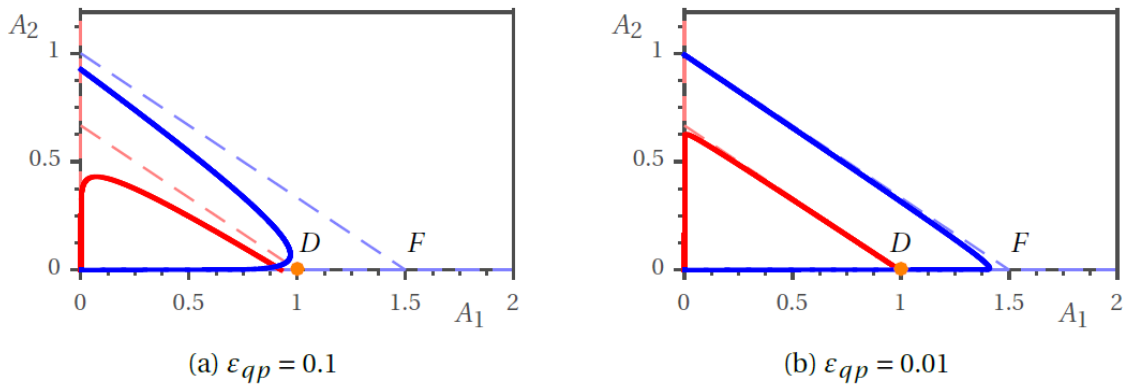


Figura 2.6: Domínio de projeto do problema de treliça composto por duas barras, utilizando o qp -approach. As linhas a cheio representam os constrangimentos relaxados. As linhas a traço interrompido representam os constrangimentos originais. Adaptado de Verbart (2015).

2.3.3 Relaxamento da tensão

Recentemente, uma prática comum tem sido a de considerar um relaxamento da tensão (Le *et al*, 2010) ou penalização da tensão (Holmberg, *et al*, 2013) e que na maioria dos casos se baseia no qp -approach.

Em vez de se considerar a tensão microscópica, considera-se uma tensão relaxada que é definida pela perturbação da tensão microscópica por uma função de relaxamento, ou seja:

$$\tilde{\sigma}_e = \phi(\rho_e; \varepsilon)\sigma_e \quad (2.9)$$

Onde $\phi(\rho_e; \varepsilon)$ é a função de relaxamento que pode depender de um parâmetro de relaxamento ε . A função de relaxamento é escolhida tal que a tensão relaxada seja zero quando a densidade é zero e dê um valor correto da tensão para densidades sólidas:

$$\phi = \begin{cases} 1, & \text{para } \rho = 1 \\ 0, & \text{para } \rho = 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

Outras definições de tensão relaxada têm sido utilizadas. Por exemplo, em Le *et al* (2010) e Holmberg *et al* (2013) a tensão relaxada foi definida baseada na seguinte função de relaxamento:

$$\phi = \rho^{\varepsilon_{qp}}, \quad \text{com } \varepsilon_{qp} = p - q > 0 \quad (2.11)$$

Outra função de relaxamento foi utilizada em Luo & Kang (2012) e é definida por:

$$\phi = \frac{1 - \cos(\pi\rho)}{2} \quad (2.12)$$

Nesta formulação, a tensão relaxada não depende de um parâmetro de relaxamento, como o ε_{qp} , que controle o quanto a tensão relaxada se desvia da tensão microscópica.

2.3.4 Comparação entre os métodos de relaxamento

Para que seja possível fazer-se a comparação entre o efeito do ε -relaxation e do qp -approach, é necessário reescrever-se ambos os constrangimentos relaxados na mesma forma genérica:

$$\tilde{g} = \frac{|\sigma|}{\sigma_{lim}} - \alpha(\rho; \varepsilon) \leq 0 \quad (2.13)$$

Onde α pode ser interpretado como a perturbação causada pelos métodos de relaxamento na tensão admissível e que depende da variável de densidade ρ e do parâmetro de relaxamento ε . A figura 2.7 mostra o efeito dos dois métodos de relaxamento na tensão admissível. Para o ε -relaxation foi escolhido um parâmetro $\varepsilon = 0.01$, enquanto que para o qp -approach foi escolhido um parâmetro de relaxamento, ε_{qp} , tal que as respectivas funções de relaxamento tenham o mesmo valor para $\rho = 0.01$ (na figura 2.7a) e $\rho = 0.1$ na (figura 2.7 b). A figura mostra que ambos os métodos perturbam o problema original relaxando o constrangimento. Na vizinhança de $\rho = 0$, α tende para o infinito, tal que o constrangimento de tensão seja sempre satisfeito, quando a densidade é suficientemente pequena. A diferença entre os dois métodos é que o ε -

relaxation geralmente perturba o problema na vizinhança de densidade zero, enquanto que o qp -approach perturba o constrangimento ao longo de toda a gama de densidades. Concluindo, o qp -approach geralmente oferece uma aproximação mais suave, o que é benéfico para otimização baseada no gradiente.

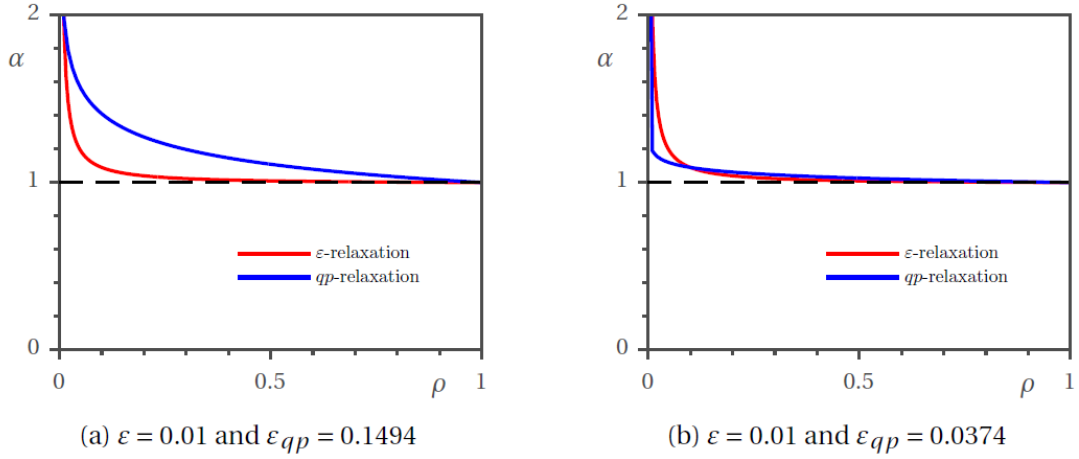


Figura 2.7: Funções de relaxamento. O parâmetro de relaxamento $\varepsilon_{qp} > 0$ é escolhido tal que as funções intersectem em (a) $\rho = 0.01$ e (b) $\rho = 0.1$. Adaptado de Verbart (2015).

Concluindo, observa-se que o ε -relaxation e o qp -approach são duas abordagens estritamente matemáticas que perturbam o domínio admissível original, substituindo o conjunto original de constrangimentos por um conjunto relaxado. Para além disso, está provado que ambas perturbam de forma semelhante o domínio admissível, num problema de treliça composta por duas barras. Adicionalmente, concluiu-se que o ε -relaxation perturba os constrangimentos originais localmente quando a densidade se aproxima de zero, pelo que o qp -approach fá-lo de forma gradual, ao longo de toda a gama da variável de projeto. Por fim, foi discutida a utilização de uma tensão relaxada, obtida através da multiplicação da tensão microscópica por uma função de relaxamento, de forma a assegurar que a tensão seja nula para densidades iguais a zero. Para determinadas funções de relaxamento, esta técnica é, de fato, bastante semelhante ao qp -approach. No entanto, esta abordagem distingue-se de ambas a ε -relaxation e a qp -approach por não ser estritamente matemática e alterar a física do problema.

2.3.5 Implementação de constrangimentos de tensão

Uma das formas mais comuns de aplicar constrangimentos de tensão, num problema de otimização topológica, é limitando o valor da tensão em determinados pontos em todos os elementos. Esta abordagem é considerada local (*local constraint approach*) e foram vários os

autores que optaram pela mesma, como por exemplo Pereira *et al*, (2004), Duysinx & Bendsøe (1998). De forma a reduzir o custo computacional, os mesmos optaram por calcular apenas a sensibilidade dos constrangimentos ativos. Outras abordagens consistem em transformar os constrangimentos locais num único constrangimento global (*global constraint approach*), utilizando uma função agregadora como a função P-norma ou a função Kreisselmeier-Steinhauser (KS) (Kreisselmeier & Steinhauser, 1979; Yang & Chen, 1996; Duysinx & Sigmund, 1998; Guilherme & Fonseca, 2007; Holmberg *et al*, 2013). Uma desvantagem é que não permite um controlo local da tensão tão rigoroso. Uma última abordagem, conhecida *block aggregated constraint approach*, estabelece um compromisso entre as duas abordagens anteriores e baseia-se em agrupar os elementos em blocos (com n elementos) e definir um único constrangimento para cada um desses blocos (París *et al* 2010; Lee *et al* 2012). Neste caso, cada constrangimento pode ser definido como o máximo rácio dentro de cada bloco, ou seja:

$$\sigma_{max} = \max \left(\frac{F(\sigma_e)}{\sigma_y} \right) \quad (2.14)$$

no entanto, como esta função não é derivável a função agregadora P-norma,

$$\sigma_{PN} = \left[\sum_{e=1}^n \left(\frac{F(\sigma_e)}{\sigma_y} \right)^p \right]^{\frac{1}{p}} \quad (2.15)$$

ou a função Kreisselmeier-Steinhauser (KS) (Kreisselmeier & Steinhauser, 1979; Poon & Martins, 2007),

$$\sigma_{KS} = \frac{1}{p} \ln \left[\sum_{e=1}^n \exp \left(p \frac{F(\sigma_e)}{\sigma_y} \right) \right] \quad (2.16)$$

são preferíveis.

2.3.6 Formulação do problema de otimização

Um problema de otimização topológica com critérios de tensão pode ser definido como a minimização da massa, em função da densidade, com constrangimentos de tensão. À semelhança do que acontece com a formulação clássica de minimização de *compliance* com constrangimento de volume torna-se necessário penalizar as densidades intermédias. Logo, a formulação da função da massa pode ser redefinida como (Haber *et al*, 1993):

$$m(\rho) = \sum_{e=1}^N [\rho_e + \alpha \rho_e (1 - \rho_e)] \quad (2.17)$$

onde α é um coeficiente de penalização. Outras versões similares desta formulação podem ser consultadas em Pereira *et al*, (2004), Guilherme & Fonseca, (2007) e París *et al*, (2009). Na figura 2.7 está representada esta função de massa penalizada, a função de rigidez penalizada através do método SIMP e a função de relaxamento de tensões, em função da densidade, segundo Lee (2012).

Segundo o mesmo autor, a formulação do problema descrito fica:

$$\min_{\rho_e} m(\rho) = \sum_{e=1}^N [\rho_e + \alpha \rho_e (1 - \rho_e)] \quad (2.18)$$

$$s. a \quad \mathbf{Ku} = \mathbf{f} \quad (2.19)$$

$$g_i \left(\frac{\rho_e^{\frac{1}{2}} \sigma_{vm}}{\sigma_y} \right) \leq 1 \quad (2.20)$$

$$0 < \rho_{min} \leq \rho \leq 1 \quad (2.21)$$

onde $g_i(\rho_e, \sigma_y)$ é a função agregadora utilizada para combinar as tensões relaxadas num bloco.

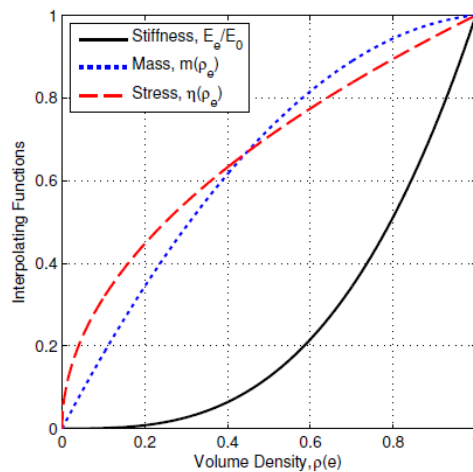


Figura 2.8: Funções de interpolação da massa, rigidez e tensão. $\alpha = 0.9$ é utilizado como coeficiente de penalização da função de massa e $p = 3.0$ para a função SIMP. Adaptado de Lee (2012).

3 Análise e otimização

3.1 Equações de elasticidade

As equações que governam a elasticidade envolvem campos de deslocamento, de deformação e de tensão e, nesta dissertação, considera-se que o material sofre apenas deformações infinitesimais e tem um comportamento linearmente elástico. Na figura 3.1 está representada a relação entre deslocamentos, deformações, tensões e forças.

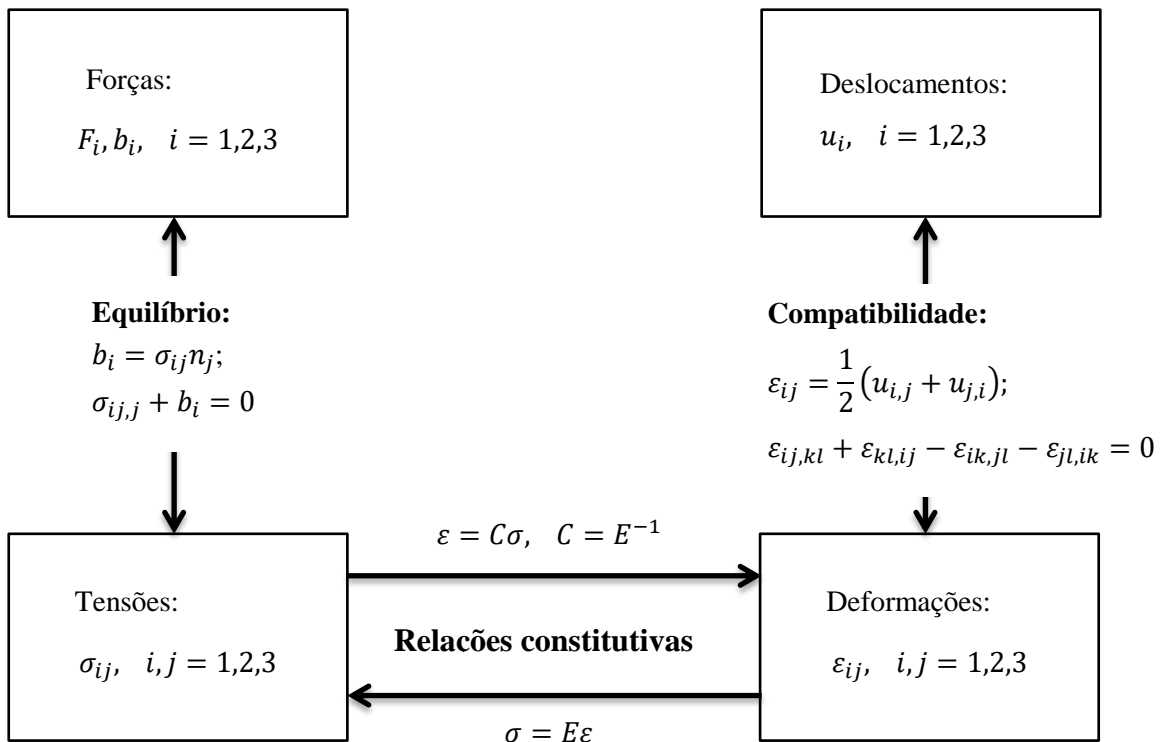


Figura 3.1: Diagrama que descreve a relação entre deslocamentos, deformações, tensões e forças.

3.1.1 Relação deslocamento-deformação

Os deslocamentos num ponto de um corpo elástico são descritos por três componentes (u_1, u_2, u_3) , todas elas dependentes das coordenadas de posição no sistema de coordenadas cartesiano (x_1, x_2, x_3) . Os deslocamentos podem ser representados em notação matricial por:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} u_1(x_1, x_2, x_3) \\ u_2(x_1, x_2, x_3) \\ u_3(x_1, x_2, x_3) \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

ou em notação indicial por:

$$u_i(x_j), \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (3.2)$$

As deformações podem ser vistas como o deslocamento diferencial por unidade de comprimento. Assim estas relacionam-se com os deslocamentos através da seguinte equação:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.3)$$

onde o tensor das deformações ε_{ij} é um tensor de segunda ordem e pode ser representado na forma matricial por:

$$\varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

e quando $i \neq j$, as distorções γ_{ij} são dadas por:

$$\gamma_{ij} = \varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ji} = 2\varepsilon_{ij} \quad (3.5)$$

Como o tensor das deformações é simétrico, ou seja $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$, existem seis componentes do tensor independentes, em vez de nove.

3.1.2 Equações de equilíbrio

O equilíbrio de forças num cubo infinitesimal resulta nas seguintes equações (equações de Cauchy):

$$\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{12}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{13}}{\partial z} + b_x = 0 \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial \tau_{21}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{23}}{\partial z} + b_y = 0 \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial \tau_{31}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{32}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial z} + b_z = 0 \quad (3.8)$$

em que b_i são as forças volúmicas (gravidade, por exemplo). As equações de Cauchy também pode ser escritas em notação indicial por:

$$\sigma_{ij,j} + b_i = 0 \quad (3.9)$$

O tensor de Cauchy σ_{ij} pode ser escrito na forma matricial por:

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \sigma_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

e à semelhança do tensor das deformações também é simétrico.

3.1.3 Relações Constitutivas

A maior parte dos materiais de engenharia são homogêneos e isotrópicos. Um material é homogêneo quando as suas propriedades são independentes da sua posição no corpo e é denominado isotrópico quando as suas propriedades num dado ponto são iguais em todas as direções espaciais. Por sua vez, os materiais compósitos são heterogêneos e, geralmente, anisotrópicos.

A lei de *Hooke* descreve o comportamento elástico dos corpos, relacionando as nove componentes de um estado de tensão com as nove componentes de um estado de deformação. A lei de *Hooke* generalizada pode exprimir-se da seguinte forma:

$$\sigma_{ij} = E_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad i, j, k, l = 1, \dots, 3 \quad (3.11)$$

sendo σ_{ij} as componentes do tensor das tensões, E_{ijkl} os coeficientes elásticos do tensor de quarta ordem que caracterizam o comportamento do material e ε_{kl} são as componentes do tensor das deformações. A lei de *Hooke* pode ser reescrita como:

$$\varepsilon_{ij} = C_{ijkl}\sigma_{kl} \quad i, j, k, l = 1, \dots, 3 \quad (3.12)$$

em que C_{ijkl} é o tensor da *compliance* ou flexibilidade que é o inverso do tensor de rigidez E_{ijkl} , ou seja:

$$E_{ijkl} = C_{ijkl}^{-1} \quad i, j, k, l = 1, \dots, 3 \quad (3.13)$$

Se o tensor das deformações for expandido resultam nove equações, cada uma das quais com nove incógnitas, logo existem 81 constantes elásticas desconhecidas. Contudo, existem simetrias nos tensores da deformação ε_{ij} e da tensão σ_{ij} tais:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji} \quad (3.14)$$

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (3.15)$$

Ou seja, das 81 constantes elásticas iniciais desconhecidas, sobram 36 independentes no tensor elástico E_{ijkl} e no tensor da *compliance* C_{ijkl} . Estas podem ser apresentadas sob a forma de matriz da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \tau_{12} \\ \tau_{23} \\ \tau_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{1111} & E_{1122} & E_{1133} & E_{1112} & E_{1123} & E_{1113} \\ E_{2211} & E_{2222} & E_{2233} & E_{2212} & E_{2223} & E_{2213} \\ E_{3311} & E_{3322} & E_{3333} & E_{3312} & E_{3323} & E_{3313} \\ E_{1211} & E_{1222} & E_{1233} & E_{1212} & E_{1223} & E_{1213} \\ E_{2311} & E_{2322} & E_{2333} & E_{2312} & E_{2323} & E_{2313} \\ E_{1311} & E_{1322} & E_{1333} & E_{1312} & E_{1323} & E_{1313} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{13} \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

e analogamente

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 2C_{1112} & 2C_{1123} & 2C_{1113} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & 2C_{2212} & 2C_{2223} & 2C_{2213} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & 2C_{3312} & 2C_{3323} & 2C_{3313} \\ 2C_{1211} & 2C_{1222} & 2C_{1233} & 4C_{1212} & 4C_{1223} & 4C_{1213} \\ 2C_{2311} & 2C_{2322} & 2C_{2333} & 4C_{2312} & 4C_{2323} & 4C_{2313} \\ 2C_{1311} & 2C_{1322} & 2C_{1333} & 4C_{1312} & 4C_{1323} & 4C_{1313} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \tau_{12} \\ \tau_{23} \\ \tau_{13} \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

Por fim, devido a haver simetria nos pares de índices (i, j) (k, l) do tensor E_{ijkl} e no tensor C_{ijkl} , tal que:

$$E_{ijkl} = E_{jikl} = E_{ijlk} = E_{klij} \quad ; \quad C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij} \quad (3.18)$$

os tensores E_{ijkl} e C_{ijkl} ficam reduzidos a apenas 21 coeficientes independentes e a Eq. (3.11) pode ser expressa na forma matricial reduzida por:

$$\sigma_i = E_{ij}\varepsilon_j \quad i, j = 1, \dots, 6 \quad (3.19)$$

onde é assumida a seguinte convenção:

$$\sigma_1 = \sigma_{11}; \sigma_2 = \sigma_{22}; \sigma_3 = \sigma_{33}; \sigma_4 = \sigma_{12}; \sigma_5 = \sigma_{23}; \sigma_6 = \sigma_{13}$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_{11}; \varepsilon_2 = \varepsilon_{22}; \varepsilon_3 = \varepsilon_{33}; \varepsilon_4 = 2\varepsilon_{12} = \gamma_{12}; \varepsilon_5 = 2\varepsilon_{23} = \gamma_{23}; \varepsilon_6 = 2\varepsilon_{13} = \gamma_{13}$$

Assim, as 36 componentes do tensor elástico são apresentadas sob a forma de matriz:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & E_{14} & E_{15} & E_{16} \\ E_{21} & E_{22} & E_{23} & E_{24} & E_{25} & E_{26} \\ E_{31} & E_{32} & E_{33} & E_{34} & E_{35} & E_{36} \\ E_{41} & E_{42} & E_{43} & E_{44} & E_{45} & E_{46} \\ E_{51} & E_{52} & E_{53} & E_{54} & E_{55} & E_{56} \\ E_{61} & E_{62} & E_{63} & E_{64} & E_{65} & E_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

Para materiais elásticos, o trabalho incremental por unidade de volume é dado por:

$$dW = \sigma_i d\varepsilon_i \quad (3.21)$$

Logo, pela Eq. (3.17):

$$dW = E_{ij}\varepsilon_j d\varepsilon_i \quad (3.22)$$

e integrando em todas as deformações, obtém-se o trabalho por unidade de volume, ou densidade de energia de deformação ou tensão:

$$W = \frac{1}{2} E_{ij}\varepsilon_i\varepsilon_j \quad (3.23)$$

3.1.4 Materiais isotrópicos

Num material isotrópico existem infinitos planos de simetria de material, logo qualquer que seja a direção considerada, o número de constantes elásticas independentes é reduzida a duas, uma que caracteriza o material segundo as direções longitudinais (x, y, z) e outra segundo os planos de corte (xy, yz, xz).

$$E_{ij} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & 0 & 0 & 0 \\ E_{21} & E_{22} & E_{23} & 0 & 0 & 0 \\ E_{31} & E_{32} & E_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(E_{11} - E_{12}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(E_{11} - E_{12}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(E_{11} - E_{12}) \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

Para o caso particular dos materiais isotrópicos a Eq. (3.11) pode ser reescrita como:

$$\sigma_{ij} = [\lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})] \varepsilon_{kl} \quad (3.25)$$

em que λ e μ são as constantes de Lamé e δ_{ij} é o delta de Kronecker. As constantes de Lamé podem se relacionar com o módulo de corte G , o módulo de Young E e o coeficiente de Poisson ν da seguinte forma:

$$\mu \equiv G = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (3.26)$$

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad (3.27)$$

A tabela 3.1 apresenta de forma resumida a relação entre as constantes elásticas λ , μ , E , G e ν .

Tabela 3.1: Relações entre constantes elásticas.

	Pares de constantes elásticas		
	λ, μ	E, G	E, ν
λ	λ	$\frac{G(E - 2G)}{3G - E}$	$\frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}$
μ	μ	G	$\frac{E}{2(1 + \nu)}$
E	$\frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu}$	E	E
ν	$\frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}$	$\frac{E}{2G} - 1$	ν

3.1.5 Tensão equivalente de von-Mises

A tensão de von-Mises é habitualmente utilizada para determinar se um material isotrópico e dúctil suportará um determinado carregamento complexo que pode misturar tensões normais e de corte. Tal é feito calculando a tensão equivalente de von-Mises, que reduz esse estado de tensão complexo a um escalar, e comparando-a à tensão de cedência do material. Isto constitui o critério de falha de von-Mises.

É de notar que o critério de falha de von-Mises representa um processo empírico e, como tal, possui erros e desvios inerentes. Continua, no entanto, a ser o método de escolha, mais de um século depois de ter sido proposto.

O conceito de tensão de von-Mises baseia-se na teoria da energia de distorção máxima. A energia de distorção é a energia necessária para deformar um material, sendo que em distorção pura, a forma do material muda mas o volume mantém-se constante.

A densidade de energia de deformação pode ser calculada a partir das tensões principais por:

$$dU_e = \frac{1}{2E} [\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2 - 2\nu(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_1\sigma_3 + \sigma_2\sigma_3)] \quad (3.28)$$

A parcela da energia de deformação por unidade de volume responsável pela dilatação do sólido pode ser expressa em termos da pressão média por:

$$dU_{dil} = \frac{3(1-2\nu)}{2E} \sigma_m^2 = \frac{1-2\nu}{6E} (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)^2 \quad (3.29)$$

De seguida, subtraindo a densidade de energia de dilatação à densidade de energia de deformação obtém-se a densidade de energia de distorção:

$$dU_{dis} = \frac{1}{12G} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_2)^2] \quad (3.30)$$

De acordo com a teoria da energia de distorção o valor da densidade de energia de distorção não deve exceder o valor correspondente ao máximo admissível em tracção simples, ou seja:

$$[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_2)^2] \leq 2\sigma_y^2 \quad (3.31)$$

$$\sqrt{\frac{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_2)^2}{2}} \leq \sigma_y \quad (3.32)$$

Em que σ_y representa a tensão de cedência do material e a parcela à esquerda da inequação representa a tensão equivalente de von Mises que também pode ser expressa em função das seis componentes do tensor das tensões como:

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{1}{2}[(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2] + 3(\tau_{12}^2 + \tau_{23}^2 + \tau_{13}^2)} \quad (3.32)$$

3.2 Modelo de material

Nesta dissertação é utilizado um modelo de material tridimensional de material compósito, com duas fases sólidas ou poroso (sólido/vazio) e de microestrutura periódica, ou seja, o meio heterogêneo é obtido através da repetição de uma célula de base unitária, nas três direções espaciais. O modelo de material está separado em duas escalas distintas. A escala macroscópica tem a dimensão característica D do domínio Ψ , ocupado pelo material heterogêneo, e é caracterizada pela densidade ou fração volúmica ρ . A escala microscópica tem como dimensão característica o comprimento linear d da célula de base que ocupa um domínio Y (assume-se domínio unitário, i.e., $|Y| = 1$) e é caracterizada pelo campo escalar de densidade $\mu(x, y)$. Assume-se também que $D \gg d$ (ver figura 3.2).

O campo escalar $\mu(y)$ é contínuo e assume valores entre 0 e 1 que se traduz na ausência ou presença de material, respetivamente. No presente trabalho é focada a escala microscópica e as topologias de cada microestrutura formam um problema local de distribuição de material, orientado pela variável de densidade μ . Nesta escala os valores intermédios não possuem significado físico. É utilizado, portanto, o método SIMP que penaliza as densidades intermédias, forçando a que as topologias obtidas sejam apenas definidas pela ausência (0) ou presença (1) de material.

A modelação numérica é feita através do *software* de elementos finitos ANSYS e distinguem-se dois problemas diferentes, o da validação da teoria da homogeneização e o da verificação de um padrão periódico no campo de tensão, ao nível da microestrutura, para um número de repetições da célula de base crescente. Para o modelo numérico da célula unitária, o domínio Y é discretizado por uma malha de elementos finitos regular $10 \times 10 \times 10$, em que cada elemento finito assume uma variável de densidade μ que é constante no elemento e é designado por SOLID45 no ANSYS. Este é um elemento hexaedro, definido por 8 nós e em que cada um possui três graus de liberdade (translação em x , y e z), o que se traduz, no caso da célula unitária, num total de 1331 nós, 1000 elementos e 3993 graus de liberdade.

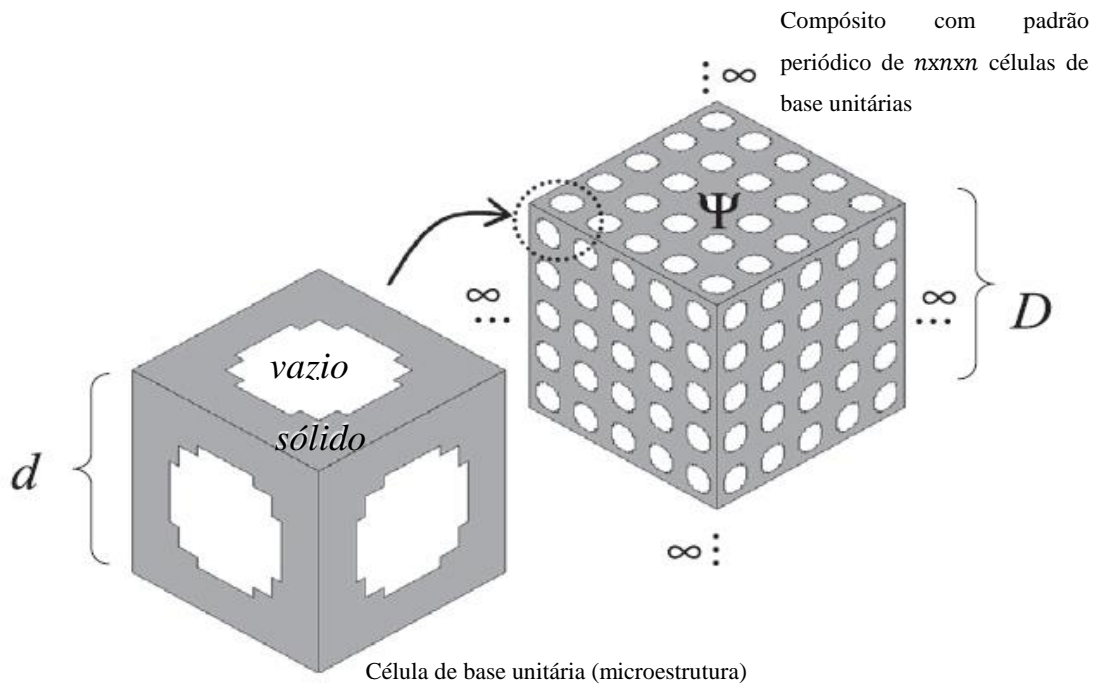


Figura 3.2: Modelo de material de material compósito de microestrutura periódica com padrão de $5 \times 5 \times 5$ (na teoria vai para infinito) células de base de dimensão característica D e uma célula de base unitária com dimensão característica d .

A figura 3.3 mostra um exemplo em que partindo de uma célula unitária, discretizada por uma malha de elementos finitos, se obtém uma distribuição ótima de densidades, através de um problema de otimização topológica.

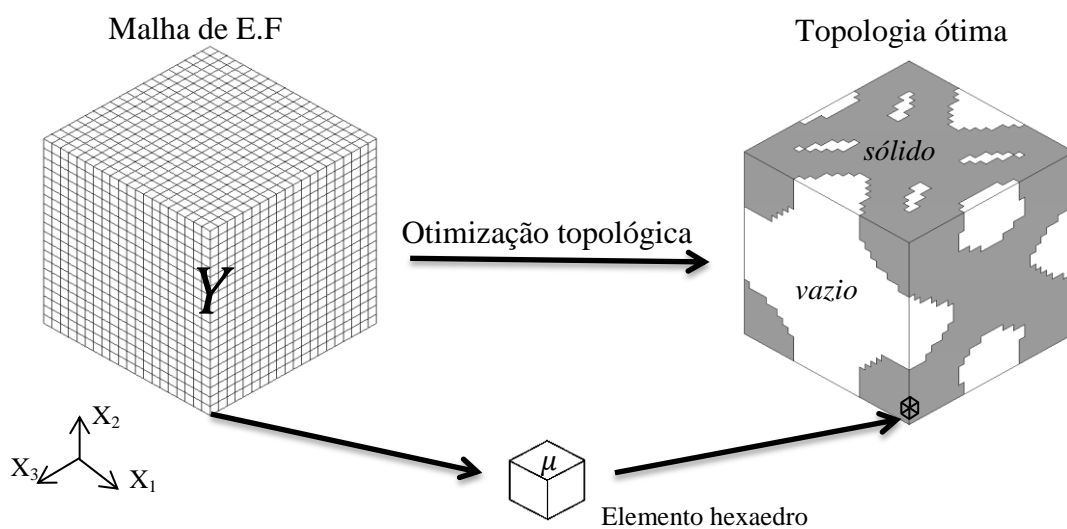


Figura 3.3: Representação da malha de elementos finitos utilizada no domínio Y e exemplo de topologia ótima.

3.3 Problema de otimização

O princípio básico da otimização é encontrar a melhor solução possível sob determinadas circunstâncias. Matematicamente o problema é formulado tipicamente como uma minimização da função objetivo, sujeito a constrangimentos. Isso pode ser expressado como:

$$\min_{\mathbf{x}} \quad f(\mathbf{x}) \quad (3.33)$$

$$\text{sujeito a} \quad g_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (3.34)$$

$$h_k(\mathbf{x}) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, p \quad (3.35)$$

$$x_i^l \leq x_i \leq x_i^u, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.36)$$

onde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ é o vetor das n variáveis de projeto, $f(\mathbf{x})$ a função objetivo e as funções $g_i(\mathbf{x})$ e $h_j(\mathbf{x})$ são os m constrangimentos de desigualdade e os p constrangimentos de igualdade, respetivamente. x_i^l e x_i^u são os limites inferior e superior de variação das variáveis de projeto x_i .

Nesta dissertação, ao nível da otimização de topologias de células de base do material periódico, aplica-se uma formulação mais clássica que visa a minimização de uma função objetivo que é a densidade de energia de tensão (*compliance*), sujeita a constrangimentos de volume ou permeabilidade, consoante o tipo de aplicação. Por exemplo, no projeto de suportes biomiméticos a imposição da permeabilidade é essencial, mas se a rigidez for o único parâmetro indispensável na função da microestrutura, então o volume é o único constrangimento utilizado. Por sua vez, a rigidez e a permeabilidade são duas propriedades conflitantes, querendo isso dizer que o favorecimento de uma deteriora a outra. Posto isto, de modo a se conseguirem obter bons compromissos entre as duas, a otimização topológica é um bom método e que permite atingir esse fim.

No projeto ótimo de material, o domínio de projeto é o da célula de base, do material de microestrutura periódica, e a sua topologia é obtida pela solução de um problema de distribuição de densidade μ . A variável de densidade μ está restringida a um intervalo $]0,1]$, em que 1 representa a presença de material e 0 a ausência do mesmo. No entanto, como se trata de um problema de meio contínuo, obtêm-se as denominadas “zonas cinzentas”, quando a variável μ toma valores intermédios. Assim é necessário a utilização do método SIMP, para que essas densidades intermédias sejam penalizadas e convirjam para 0 ou 1, dado que as mesmas não têm significado físico, ao nível da microestrutura.

O problema de otimização que visa a minimização da *compliance* com constrangimentos de volume pode ser definido da seguinte maneira:

$$\min_{\mu} \quad \frac{1}{2} C_{mnkl}^H(\mu) \bar{\sigma}_{mn} \bar{\sigma}_{kl} \quad (3.37)$$

$$\text{sujeito a } \int_Y \mu(y) dY \leq V^*; \quad 0 \leq \mu \leq 1, \quad y \in Y \quad (3.38)$$

em que μ é a densidade local, assume um valor no intervalo $]0,1]$ e depende da variável de posição y na célula de base de domínio Y . O tensor da tensão $\bar{\sigma}$ caracteriza o campo de tensões médias macroscópicas aplicadas ao compósito, C^H representa o tensor da *compliance* homogeneizado, sendo este o inverso do tensor de rigidez homogeneizado E^H . Desta forma, a solução final obtida contém uma percentagem de material, V^* , em relação ao domínio de projeto, Y , definido inicialmente. No entanto, o constrangimento deve aparecer na forma ≤ 1 , pelo que deve ser reformulado de:

$$\int \mu(y) dY \leq V^* \quad (3.39)$$

para,

$$\int \mu(y) dY + (1 - V^*) \leq 1 \quad (3.40)$$

Outra alternativa ao constrangimento de volume é a utilização de constrangimentos de permeabilidade. Estas novas restrições forçam a que o tensor da permeabilidade seja diagonal e que em cada coeficiente da diagonal (que representa cada direção espacial) seja igual ou maior que um limite k^* . Desta forma é possível obter-se uma rede de poros que garantem uma permeabilidade mínima em todas as direções espaciais, sendo a medida de permeabilidade do material poroso dado por um tensor homogeneizado K^H , como se pode ver em Coelho *et al* (2009,2011). Assim, as restrições de permeabilidade vêm dadas da seguinte forma:

$$K_{ij}^H(\mu) \geq k^*; i = j = 1, \dots, 3 \quad (3.41)$$

$$K_{ij}^H(\mu) = 0; i \neq j \text{ e } i, j = 1, \dots, 3 \quad (3.42)$$

3.3.1 Análise de sensibilidades

A análise de sensibilidades é importante num problema de otimização topológica, dado que os algoritmos de programação matemática são baseados em informação de derivadas das funções. Esta tem como objetivo quantificar de que forma a alteração de uma variável de projeto afeta a função objetivo.

Dependendo do tipo de problema, o cálculo das sensibilidades pode ser resolvido de duas formas diferentes: numericamente ou analiticamente, através do cálculo dos gradientes da função objetivo. Um método numérico pode ser o método das diferenças finitas que é de implementação simples, ao contrário dos métodos analíticos, mas em contrapartida realiza aproximações de baixa precisão. Quando o objetivo é a minimização de *compliance* com constrangimentos de volume ou permeabilidade, a análise das sensibilidades é realizada através do cálculo analítico dos gradientes da função objetivo e da função de constrangimento (ver Bendsøe & Sigmund, 2003). No entanto, para outras formulações como a introdução de critérios de tensão, o cálculo analítico dos gradientes é penoso, pelo que os métodos numéricos no cálculo das derivadas podem ser mais convenientes de utilizar, pelo menos, numa primeira fase.

3.3.2 Técnicas de filtragem

Muitas vezes os algoritmos de otimização deparam-se com instabilidades numéricas, como o fenómeno do *checkerboard*, e dependência da malha. As técnicas de filtragem têm um papel fundamental em lidar com esses fenómenos indesejáveis. *Checkerboard* refere-se a uma solução em que o material aparece distribuído num padrão que varia entre sólido e vazio, em elementos consecutivos. Assim, se a presença de material é representada pela cor preta e o vazio pela cor branca, a distribuição de material vai se assemelhar a um *checkerboard* (tabuleiro de damas; ver figura 3.4).

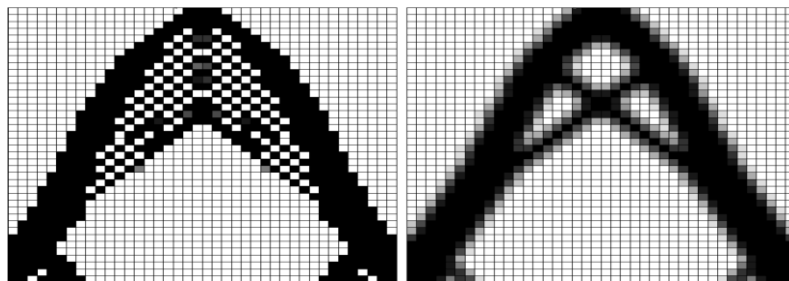


Figura 3.4: Esquerda: Não existe filtro e há presença de *checkerboard*. Direita: Existe filtro; não há presença de *checkerboard* mas existe uma camada transitória, a cinzento, entre sólido e vazio. Adaptado de Holmberg (2013).

A presença deste fenómeno cria uma rigidez muito alta que é tida como artificial (Díaz & Sigmund, 1995) e produto de uma má modelação numérica, pelo que o *checkerboard* não representa uma distribuição ótima de material. A dependência da malha, por sua vez, deve-se a obterem-se diferentes soluções para diferentes discretizações.

Tipicamente existem duas técnicas de filtragem: o filtro de sensibilidades (Sigmund, 1997) e o filtro de variáveis de projeto (filtro de densidades; Bruns & Tortorelli, 2001). A utilização de um filtro faz com que a análise de sensibilidades de um determinado elemento k seja o resultado da média ponderada entre a sensibilidade desse elemento e as sensibilidades dos elementos que o rodeiam, ou seja

$$\frac{\widehat{\partial f}}{\partial_{pk}} = \frac{\sum_{i=1}^N \widehat{H}_l \rho_i \frac{\partial f}{\partial \rho_i}}{pk \sum_{i=1}^N \widehat{H}_l} \quad (3.43)$$

onde f é uma função objetivo, ou de constrangimento, N é o número de variáveis de projeto (ou o número de elementos que compõem a malha, já que é atribuída uma variável de densidade, μ , a cada elemento), \widehat{H}_l é um operador de convolução independente da malha e é um fator de peso, dado por:

$$\widehat{H}_l = \frac{r_{min} - dist(k, i)}{r_{min}}, \quad \{i \in N \mid dist(k, i) \leq r_{min}\}, k = 1, \dots, N \quad (3.44)$$

em que $dist(k, i)$ corresponde à distancia do centro do elemento k ao centro do elemento i , como mostra a figura 3.5. Consequentemente, quanto maior for $dist(k, i)$ menor será o peso do fator \widehat{H}_l e é zero quando $dist(k, i) > r_{min}$.

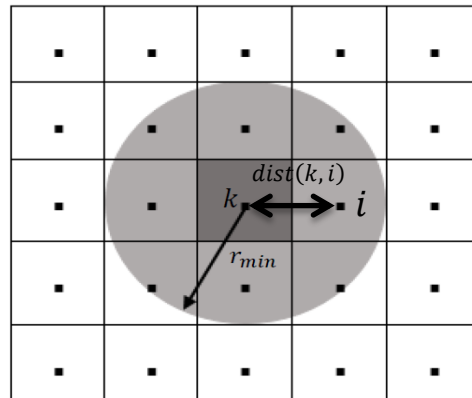


Figura 3.5: Vizinhança do elemento k definida por r_{min} . O cálculo da média das sensibilidades no elemento k contempla todos os elementos cujo centro esteja contido dentro da região delineada por r_{min} .

Adaptado de Amiano (2015).

3.3.3 MMA

O Método das Assíptotas Móveis (MMA) é um dos algoritmos de otimização mais utilizados para resolver problemas de otimização topológica, (Svanberg, 1987). Este é um método que resolve um problema original, através de uma sequência de aproximações mais simples do mesmo.

O MMA delimita um intervalo, através de duas assíptotas verticais, utilizando depois os valores atualizados e antigos da variável de projeto, de forma a determinar se a convergência está a ocorrer de forma monótona ou oscilante. Assim, para cada iteração, o otimizador ajusta esse intervalo, atualizando as assíptotas para que a convergência se dê de forma mais rápida ou conservativa.

Admitindo um problema de otimização formulado como:

$$\min F_0(\mathbf{x}), (\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n) \quad (3.45)$$

$$\text{s. a } f_j(\mathbf{x}) \leq \hat{f}_j, \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (3.46)$$

$$\underline{x}_i \leq x_i \leq \bar{x}_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.47)$$

onde $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ é o vetor das variáveis de projeto, $F(\mathbf{x})$ é a função objetivo não linear, $f_j(\mathbf{x}) \leq \hat{f}_j$ são as m funções de constrangimento, \underline{x}_i e \bar{x}_i são os limites laterais para a variável de projeto x_i . Este problema genérico é resolvido iterativamente pela seguinte ordem:

- i. Início dá-se na iteração 0 ($k=0$) e é escolhido um ponto inicial \mathbf{x}^0 ;
- ii. Calcula, num determinado ponto \mathbf{x}^k , $f_j(\mathbf{x}^k)$ e $\nabla f_j(\mathbf{x}^k)$ para $j = 1, 2, \dots, m$;
- iii. Gera um sub problema P^k através de uma função de aproximação, descrita abaixo;
- iv. Gera um problema dual para o sub problema P^k . Resolve o problema dual e, logo, P^k ;
- v. Atualiza \mathbf{x}^k , $k = k + 1$. Verifica se existe convergência, caso contrário volta a (ii).

Desta forma, o sub problema para a k -ésima iteração é dado por:

$$\min F_0(\mathbf{x}) \approx F(\mathbf{x}^k) + \sum_{i=1}^n \left(\frac{r_i^k}{U_i^k - x_i} + \frac{s_i^k}{x_i - L_i^k} \right) \quad (3.48)$$

$$\text{s. a } f_j^k(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^n \left(\frac{r_{ji}^k}{U_i^k - x_i} + \frac{s_{ji}^k}{x_i - L_i^k} \right) \leq \hat{f}_j, \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (3.49)$$

$$\max \{ \underline{x}_i, \alpha_i^k \} \leq x_i \leq \max \{ \bar{x}_i, \beta_i^k \} \quad (3.50)$$

Aqui os parâmetros r_i^k e s_i^k são estimados por:

$$r_{ji}^k = \begin{cases} (U_i^k - x_i^k)^2 \frac{\partial f_j}{\partial x_i}, & \text{se } \frac{\partial f_j}{\partial x_i} > 0 \\ 0, & \text{se } \frac{\partial f_j}{\partial x_i} \leq 0 \end{cases} \quad (3.51)$$

$$s_{ji}^k = \begin{cases} 0, & \text{se } \frac{\partial f_j}{\partial x_i} \geq 0 \\ -(x_i^k - L_i^k)^2 \frac{\partial f_j}{\partial x_i}, & \text{se } \frac{\partial f_j}{\partial x_i} < 0 \end{cases} \quad (3.52)$$

Os parâmetros α_i^k, β_i^k são limites escolhidos para evitar divisão por zero e tal que,

$$L_i^k < \alpha_i^k < x_i^k < \beta_i^k < U_i^k \quad (3.53)$$

Este método é o indicado quando a inicialização do problema é escolhida para que o sub problema inicial seja admissível, mas na maioria dos casos pode não ser prático escolher esse ponto.

O MMA tem as suas raízes no CONLIN, que é um caso particular do primeiro, nomeadamente alterando parâmetros do algoritmo tal que as asymptotas escolhidas sejam $L_i = 0$ e $U_i \rightarrow \infty$.

3.4 Homogeneização

Imaginando que se pretende caracterizar mecanicamente a resposta de um material compósito, quando sujeito a condições de fronteira que podem ser de tração ou deslocamento imposto, a resolução deste problema pode ser feita através de métodos analíticos ou numéricos. Os métodos analíticos são directos e as equações diferenciais que caracterizam o problema podem ser difíceis de resolver, logo a aplicação desses métodos está limitada a geometrias muito simples. Por sua vez, os métodos numéricos (como o MEF) adaptam-se melhor a geometrias complexas. No entanto, os materiais compósitos apresentam heterogeneidades que, quando presentes em grande número, representam também um obstáculo à utilização dos métodos numéricos pois seria necessário utilizar uma malha de E.F tão detalhada ou refinada que se traduziria num esforço computacional proibitivo.

Na teoria da homogeneização o meio heterogéneo é substituído por um contínuo homogéneo equivalente que traduz o comportamento em média (homogeneizado) do meio

original, i.e., tem propriedades mecânicas equivalentes. O detalhe da modelação do problema fez-se apenas ao nível de uma célula de base unitária, evitando-se assim um modelo de todo o meio heterogéneo.

Nesta dissertação a teoria da homogeneização é aplicada em meios periódicos, sendo importante verificar de que forma o compósito real estudado se aproxima das hipóteses assumidas pela teoria da homogeneização que são, principalmente, duas: (1) periodicidade infinita do meio heterogéneo ou, por outras palavras, assume-se que a célula de base unitária que tem dimensão característica d é infinitesimal quando comparado com a dimensão característica D do domínio material macroscópico, ou seja, $\varepsilon = \frac{d}{D} \rightarrow 0$ (ver figura 3.6; Guedes & Kikuchi, 1990) em que ε pode ser entendido aqui como o fator de separação de escalas, microscópica e macroscópica. Assim, a homogeneização trata o problema como adimensional quando na realidade os materiais compósitos apresentam heterogeneidades e domínio macroscópico com dimensões finitas ($0 < \varepsilon < 1$); (2) periodicidade infinita do domínio microscópico dentro do domínio macroscópico, tal que qualquer propriedade física ou geométrica Ψ é periódica, ou seja, a seguinte condição é imposta (ver também figura 3.6):

$$\mathbf{x} \in \Psi \text{ e } (\mathbf{x} + \mathbf{y}) \in \Psi \Rightarrow \psi(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \psi(\mathbf{x}) \quad (3.54)$$

As propriedades elásticas homogeneizadas são calculadas através da seguinte equação (ver Guedes & Kikuchi, 1990):

$$E_{ijk}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y E_{pqrs}(\mu) \left(\delta_{rk} \delta_{sm} - \frac{\partial \chi_r^{km}}{\partial y_s} \right) \left(\delta_{pi} \delta_{qj} - \frac{\partial \chi_p^{ij}}{\partial y_q} \right) dY \quad (3.55)$$

onde $|Y|$ representa o volume do domínio da célula unitária, δ o delta de Kronecker e χ^{km} são as deformações características da célula quando submetidas à aplicação de seis estados de tensão de teste unitário ($e_{rs}^{0(km)}$) e são calculadas por:

$$\int_Y E_{ijrs}(\mu) \frac{\partial \chi_r^{km}}{\partial y_s} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = \int_Y E_{ijrs}(\mu) e_{rs}^{0(km)} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall \mathbf{v} \in V_{\mathbb{F}} \quad (3.56)$$

Aqui, E_{pqrs} é o tensor das propriedades elásticas calculado pelo modelo SIMP, ou seja:

$$E_{pqrs}(y) = \mu(y)^p E_{ijkm}^0, \quad p > 1 \quad (3.57)$$

onde E_{ijkl}^0 representa o tensor da elasticidade de um material base, sólido e isotrópico, p é a constante de penalização do SIMP e μ é a variável de projeto que é função da variável de posição y .

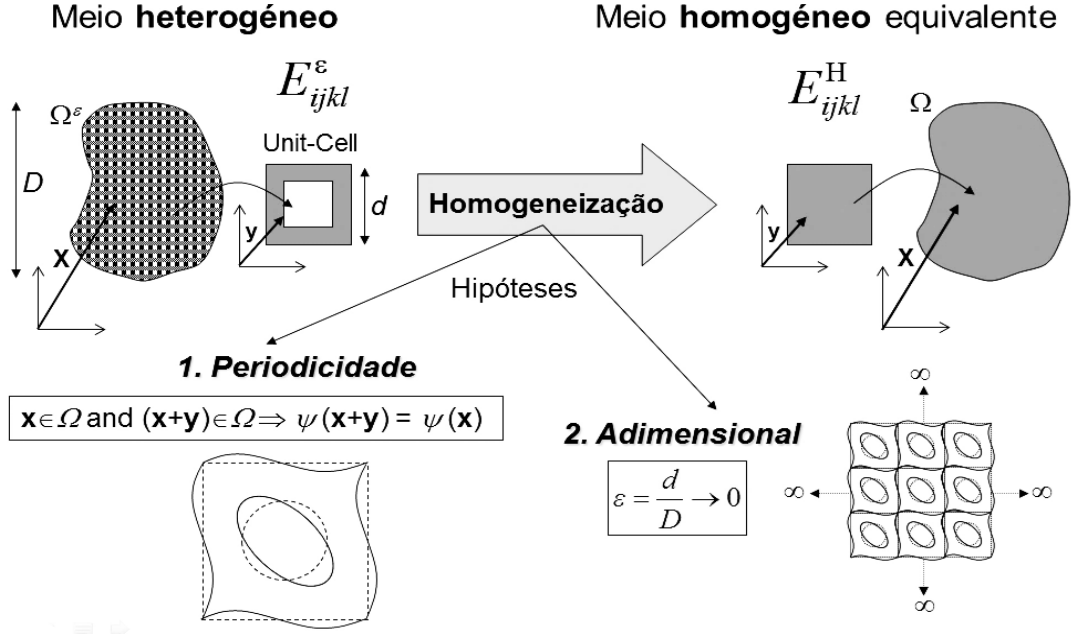


Figura 3.6: Método da homogeneização utilizado na caracterização de um material compósito celular de microestrutura periódica.

3.4.1 Método da homogeneização inversa

O algoritmo de otimização utilizado no presente trabalho utiliza o método da homogeneização inversa que utiliza o método da homogeneização e permite projetar materiais compósitos de microestrutura periódica, com determinadas propriedades alvo (ver figura 3.7).

Como descrito anteriormente neste capítulo, o problema típico de homogeneização permite determinar as propriedades homogeneizadas, E_{ijkl}^H , de um determinado material, não homogêneo, de microestrutura periódica. Estas são determinadas através da análise da célula de base. O método da homogeneização inversa funciona ao contrário, isto é, determina a topologia da célula de base, do material de microestrutura periódica, que possui determinadas propriedades E_{ijkl}^H , preestabelecidas, como ilustrado na figura 3.7.

Geralmente o problema de homogeneização inversa possui várias soluções diferentes, dado que dois (ou mais) materiais de microestrutura periódica diferente, podem ter as mesmas propriedades constitutivas. Assim, para que o número de soluções diferentes possíveis seja reduzido, o problema de homogeneização inversa pode ser utilizado como um problema de

otimização, onde o objetivo passa, por exemplo, em encontrar o material mais rígido possível, dado um constrangimento de volume, e que possui as propriedades elásticas prescritas. Desta forma, o problema de otimização pode ser encarado como um problema de otimização topológica, em que domínio de projeto é, como anteriormente, a célula de base do material de microestrutura periódica e as variáveis de projeto são as densidades dos elementos finitos que discretizam esse domínio.

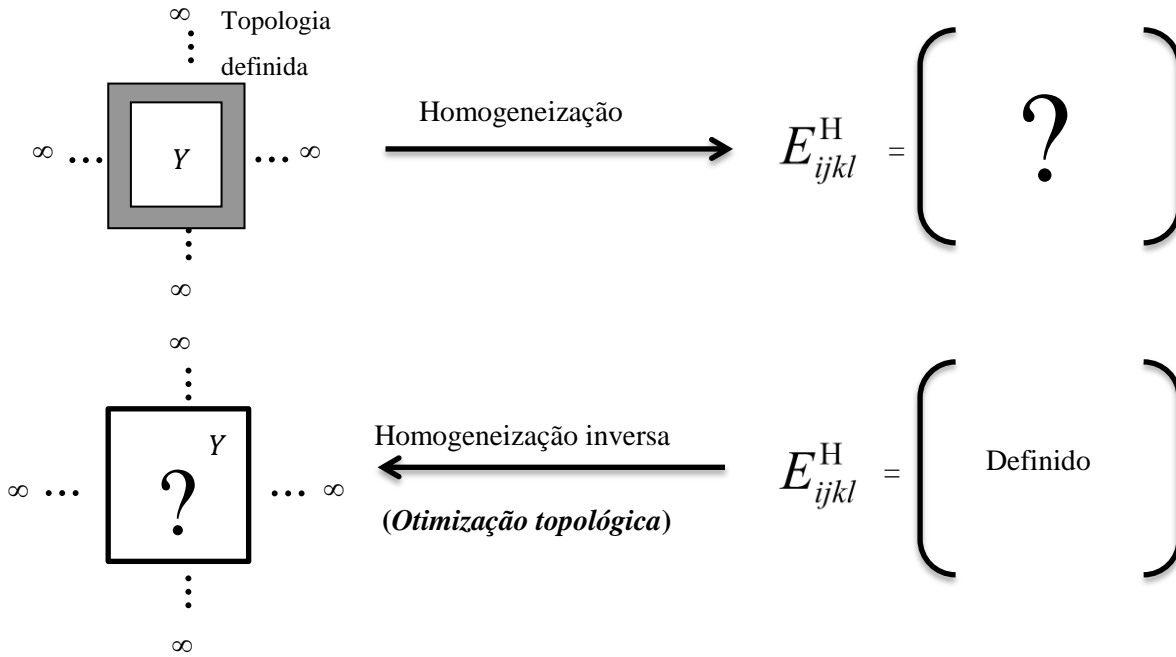


Figura 3.7: Homogeneização vs homogeneização inversa.

A topologia inicial é determinante para a boa convergência do algoritmo e para o problema de minimização de *compliance*, esta assume-se dada pela distribuição de densidades, conforme mostra a figura 3.8. Aqui é atribuído um valor de densidade constante aos elementos que compõem as paredes da célula, enquanto a densidade na restante parte interior do domínio é uniforme de valor igual ao necessário para verificar a fração de volume imposta no domínio Y da célula de base.

No fluxograma da figura 3.9 é ilustrado o algoritmo de otimização que a partir de uma topologia inicial da célula de base resolve o problema de homogeneização. Caso o resultado obtido não satisfaça um critério de convergência a topologia é alterada e repete-se o processo, até que a topologia obtida possua o mínimo de densidade de energia de tensão ou *compliance*. Para uma maior liberdade e controlo sobre o algoritmo de otimização, o critério de paragem

escolhido é o número de iterações, sendo que a convergência da função objetivo pode, igualmente, ser satisfeita.

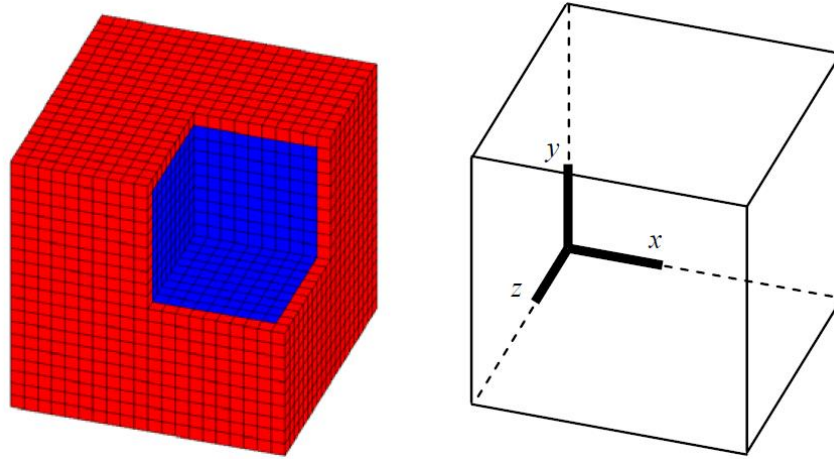


Figura 3.8: Topologia inicial considerada no problema de minimização de *compliance*, para uma célula $20 \times 20 \times 20$. Os elementos assumem um valor de densidade de 0.75 nas paredes e 0.407 no interior (fração volumica de 50%). Adaptado de Coelho (2009).

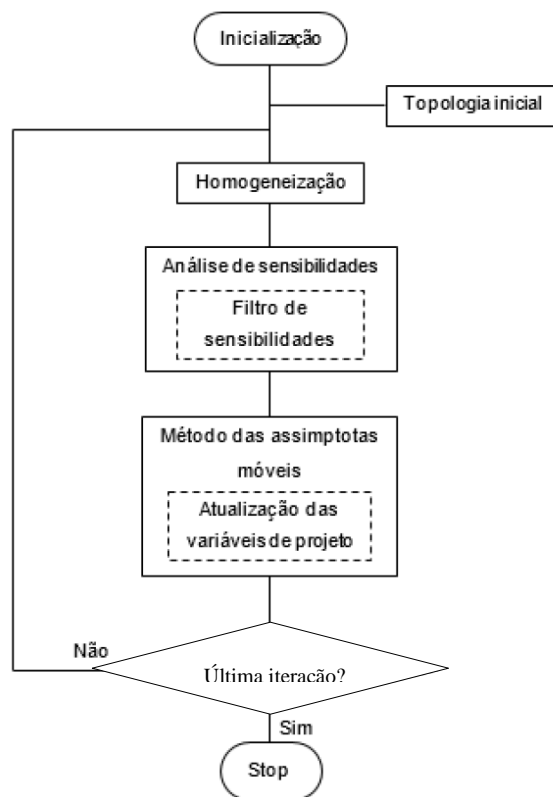


Figura 3.9: Algoritmo de otimização utilizado para problema de minimização de *compliance*. Adaptado de Amiano (2015).

3.4.2 Análise de tensão pela homogeneização

As tensões microscópicas σ_{ij} (ao nível do material) são obtidas por homogeneização assintótica. Assim, considerando as deformações características χ_k^{rs} da Eq. (3.55), essas tensões podem ser obtidas por:

$$\sigma_{ij} = E_{ijk m} \left(\delta_{kr} \delta_{ms} - \frac{\partial \chi_k^{rs}}{\partial y_m} \right) \varepsilon_{rs}^0 \quad (3.58)$$

onde ε_{rs}^0 é o campo de deslocamento macroscópico (médio) e relaciona-se com a tensão macroscópica da Eq. (3.37) através de:

$$\varepsilon_{rs}^0 = C_{rspq}^H \sigma_{pq}^0 \quad (3.59)$$

Os resultados da tensão microscópica σ_{ij} representam os estados de tensão tridimensionais que variam ao longo do domínio da célula de base unitária Y . A metodologia utilizada para se obterem esses mesmos resultados de tensão é baseada no *software* POSTMAT (ver Guedes & Kikuchi (1990) e Ferreira *et al* (2013)).

3.5 Medidas de anisotropia

Num material a anisotropia caracteriza-se como a dependência de direção (ou falta de isotropia). A madeira (material compósito celular) é um exemplo de material anisotrópico, cujas propriedades mecânicas dependem da disposição das suas fibras.

Um material de microestrutura periódica pode ser classificado quanto ao seu nível de anisotropia através de uma representação gráfica, sendo para isso necessário realizar-se a inversão do tensor de quarta ordem da elasticidade homogeneizado \mathbf{E}^H para se obter o tensor da *compliance* \mathbf{C}^H e respetiva rotação, segundo a seguinte equação:

$$\mathbf{C}_{ijkl}^H = R_{im} R_{jn} R_{kp} R_{lq} \mathbf{C}_{mnpq}^H \quad (3.60)$$

O tensor de rotação \mathbf{R} é definido em termos dos ângulos de *Euler*, θ_i :

$$R_{ij}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta_1) & \sin(\theta_1) \\ 0 & -\sin(\theta_1) & \cos(\theta_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_2) & 0 & \sin(\theta_2) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta_2) & 0 & \cos(\theta_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_3) & \sin(\theta_3) & 0 \\ -\sin(\theta_3) & \cos(\theta_3) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.61)$$

Nesta multiplicação matricial, considerando um referencial cartesiano $OX_1X_2X_3$, a primeira matriz corresponde a uma rotação de θ_1 em torno do eixo x_1 , a segunda a uma rotação de θ_2 em torno de x_2 e a terceira a uma rotação de θ_3 em torno de x_3 .

No capítulo 5 serão apresentadas representações gráficas que demonstram o estado de anisotropia das topologias obtidas, pelo problema de otimização. Complementarmente é também apresentado um parâmetro adimensional \mathcal{A} que quantifica, numericamente, a anisotropia de material (Challis *et al*, 2008) e é obtido pela seguinte equação:

$$\mathcal{A} = \sqrt{\frac{(E_{ijkl}^* - E_{ijkl}^{*,iso})(E_{ijkl}^* - E_{ijkl}^{*,iso})}{E_{ijkl}^{*,iso} E_{ijkl}^{*,iso}}} \quad (3.62)$$

Esta medida representa a “distância” entre o tensor da elasticidade E_{ijkl}^* e o mais próximo tensor da elasticidade isotrópico $E_{ijkl}^{*,iso}$. Este parâmetro toma valores entre 0 (isotrópico) e 2 (máximo de anisotropia).

4 Análise de efeitos de escala

Um dos aspetos mais relevantes desta dissertação é o estudo dos efeitos de escala. Pretende-se assim avaliar os efeitos de escala, estudando o erro associado à comparação entre os valores da tensão obtidos, para um determinado carregamento, pela teoria da homogeneização e os valores da tensão obtidos, pelo mesmo carregamento, por simulação numérica de ensaios mecânicos normalizados. Por outro lado pretende-se, também, avaliar os efeitos de escala na obtenção de um padrão periódico na tensão, para um determinado carregamento normalizado.

As análises são feitas através do *software* ANSYS e baseiam-se na realização de ensaios normalizados, com aplicação de condições de fronteira de Neumann e Dirichlet, a um compósito que é formado pela repetição de uma célula de base n vezes, nas três direções espaciais. A topologia dessa célula de base, é determinada através da utilização de códigos Fortran que resolvem um problema de otimização topológica, conforme apresentado na secção 3.3. Os algoritmos utilizados devem ser o mais eficientes possível, de modo a que não se esgotem os limites computacionais disponíveis.

Os códigos APDL utilizados são compostos por uma parte de pré-processamento e pós-processamento que serão abordadas na secção 4.1 e 4.2, respetivamente. Para além disso, existe um conjunto de dados de *input* que são introduzidos manualmente, no cabeçalho do programa. Alguns dos mais importantes são:

**Input
manual**

- N° de repetições da célula de base em x, y e z;
- Dimensão da célula de base unitária;
- Dimensão da malha;
- Módulo de Young e coef. de Poisson do material 1;
- Módulo de Young e coef. de Poisson do material 2.

Nesta dissertação são considerados os materiais compósitos (de duas fases sólidas) e os materiais porosos ou celulares (fase sólida/vazio). No primeiro caso, adota-se um rácio de rigidez entre o material 1 e o material 2 de $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1$ e será utilizado tanto para C.F. de Neumann como de Dirichlet. Já no segundo caso esse rácio é $\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}$ e será apenas utilizado com aplicação de C.F. de Dirichlet (o porquê será explicado na subsecção 4.1.1).

A versão do ANSYS utilizado neste trabalho apresenta algumas limitações, nomeadamente no número máximo de nós permitidos (256000 nós). Assim, optou-se por utilizar uma malha de elementos finitos $10 \times 10 \times 10$. Desta forma consegue-se avaliar um fator de escala n que varia de $n = 1$ a $n = 5$ sem exceder o número máximo de nós, imposto pelo *software*.

A figura 4.1 representa esquematicamente o que foi referido nos parágrafos anteriores.

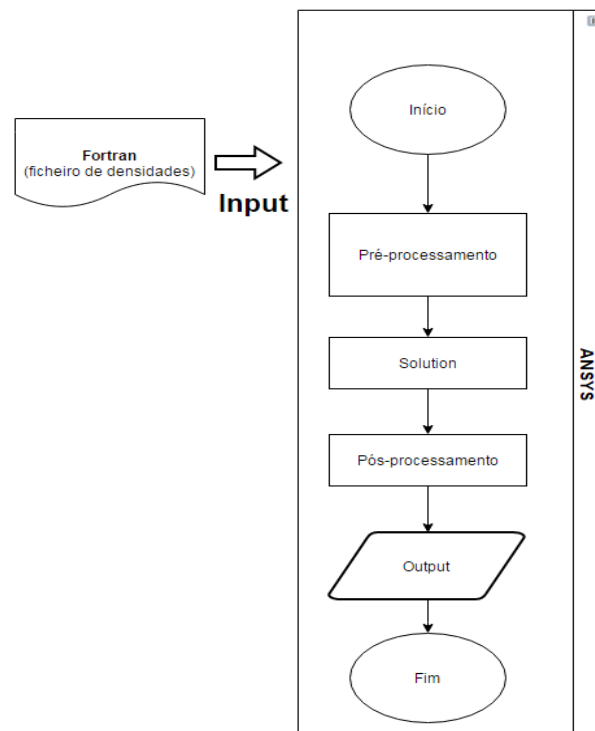


Figura 4.1: Simulação numérica em ANSYS.

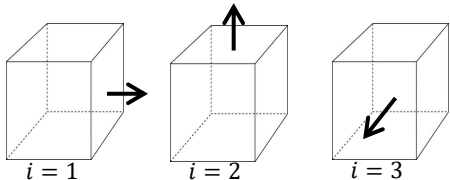
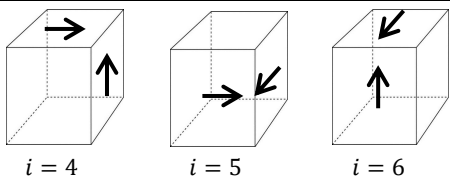
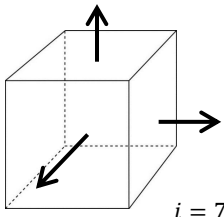
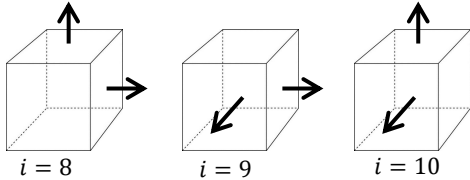
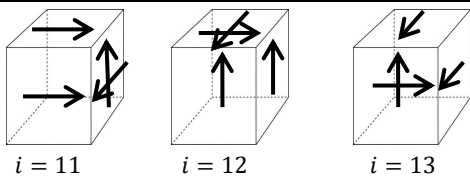
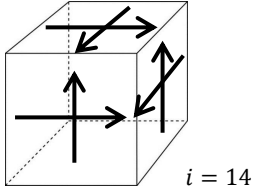
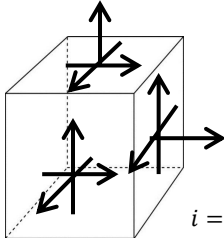
4.1 Pré-processamento

O pré-processamento é composto por um conjunto de algoritmos que tem como principal função gerar o compósito que se pretende estudar, com base numa topologia de célula de base unitária, e aplicar-lhe condições de fronteira de tensão ou deslocamento constante, ou seja, Neumann ou Dirichlet.

Primeiro é gerado um cubo, discretizado por uma malha de elementos finitos (definida no cabeçalho do código). Como referido anteriormente, a topologia da célula de base unitária é obtida através de algoritmos Fortran que resolvem um problema de distribuição ótima de material, formulado como a minimização de *compliance* com constrangimento de volume ou permeabilidade, dado um determinado campo de tensão macroscópico. Como resultado obtém-se um ficheiro de *output* que pode ser designado como ficheiro de densidades e contém o valor de densidade que cada elemento da malha assume. Assim, para uma malha $10 \times 10 \times 10$, por exemplo, esse ficheiro contém 1000 valores de densidade, cada um referente aos 1000 elementos da malha. Este ficheiro é utilizado como *input* para os códigos APDL que atribui cada valor desse ficheiro ao elemento da malha respectivo, i.e., o primeiro valor de densidade é atribuído ao elemento da malha, do compósito gerado, com a mesma numeração e assim sucessivamente. Como foi explicado no capítulo anterior, é utilizado o método SIMP para que se evitem “zonas cinzentas” na distribuição de material, logo, idealmente o ficheiro de densidades obtido seria composto apenas por 0 (vazio) ou 1 (material), o que nem sempre sucede. Para se contornar esse problema, o código assume qualquer valor abaixo de um $x_{min} = 0,5$ como material 2 e acima ou igual como material 1, e aos quais são atribuídos os respectivos valores de módulo de Young e coeficiente de Poisson. De seguida, o padrão periódico do compósito é gerado, através da repetição da célula de base obtida, nas três direções espaciais. Por fim, realizam-se os ensaios normalizados, pela aplicação das condições de fronteira de Dirichlet ou Neumann.

Na secção 4.1.1 são caracterizadas as condições de fronteira de deslocamento (Dirichlet) e tensão (Neumann) que foram utilizadas na realização dos ensaios numéricos. Estes regem-se por modelos teóricos (normalizados) de caracterização das propriedades mecânicas. Para além de ensaios com estados de carga independentes são, também, utilizados estados de carga combinados (ou mistos), como mostra a tabela 4.1.

Tabela 4.1: Tipos de carregamentos utilizados nos ensaios normalizados.

	Estado de carga	Componente	Representação
Carregamentos independentes	Uniaxial	$x; y; z$	
	Corte	$xy; xz; yz$	
Carregamentos combinados	Triaxial/Hidrostático	$x, y \text{ \& } z$	
	Biaxial	$x \text{ \& } y; x \text{ \& } z; y \text{ \& } z$	
	Corte2	$xy \text{ \& } xz; xy \text{ \& } yz; xz \text{ \& } yz$	
	Corte3	$xy, yz \text{ \& } xz$	
	Tensor cheio	$x, y, z, xy, yz \text{ \& } xz$	

No ANSYS, a modelação do rácio entre a fase sólida e vazia é feita directamente através do valor do módulo de Young atribuído aos elementos que modelam cada uma das fases.

O pré-processamento é igual, tanto para o estudo dos efeitos de escala na célula de base unitária central como para o da periodicidade da tensão e é descrito pelo fluxograma da figura 4.2.

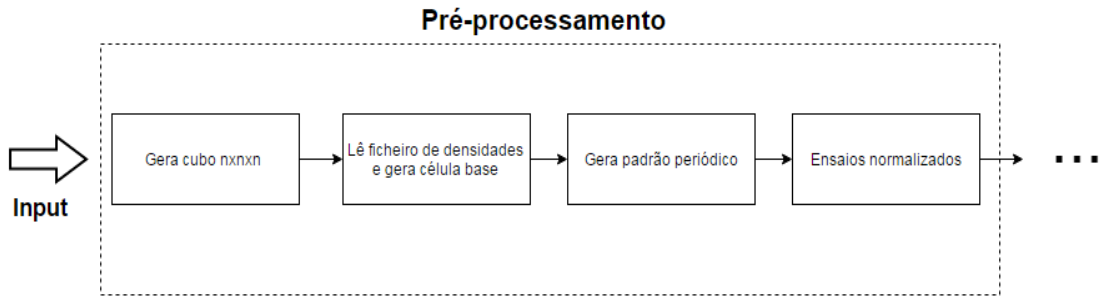


Figura 4.2: Pré-processamento em ANSYS.

4.1.1 Ensaio normalizados

4.1.1.1 Condições de Dirichlet

Tal como em Zohdi & Wriggers (2004), as condições de fronteira de Dirichlet são implementadas da seguinte forma:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x})|_{\partial\psi} = \boldsymbol{\Theta}^i \cdot \mathbf{x}|_{\partial\psi} \quad i=1, \dots, 15 \quad (4.1)$$

Onde $\partial\psi$ representa a fronteira do material, \mathbf{u} é vetor de deslocamento, \mathbf{x} o vetor de posição espacial, β é uma constante e $\boldsymbol{\Theta}^i$ é um tensor que está definido da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Theta}^i = & \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & \beta & 0 \\ \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \\ 0 & \beta & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & \beta \\ 0 & 0 & 0 \\ \beta & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ & \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & \beta & \beta \\ \beta & 0 & 0 \\ \beta & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & \beta & 0 \\ \beta & 0 & \beta \\ 0 & \beta & 0 \end{bmatrix} \\ & \begin{bmatrix} 0 & 0 & \beta \\ 0 & 0 & \beta \\ \beta & \beta & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & \beta & \beta \\ \beta & 0 & \beta \\ \beta & \beta & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \beta & \beta & \beta \\ \beta & \beta & \beta \\ \beta & \beta & \beta \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.2)$$

em que o índice i corresponde aos quinze tipos de carregamentos utilizados (ver tabela 4.1).

Tanto no caso dos ensaios longitudinais como nos de corte a deformação aplicada nos elementos é constante. Exemplifica-se em seguida para os casos $i = 1$ (tração em x) e $i = 4$ (corte no plano xy).

Assim, para um ensaio longitudinal de deslocamento imposto, tem-se, para $i = 1$:

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Donde resulta,

$$\begin{cases} u_1 = \beta x_1 \\ u_2 = 0 \\ u_3 = 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

o que significa que é aplicado um deslocamento na direção u_1 , linearmente dependente da coordenada de posição x_1 , e os deslocamentos nas restantes direções são nulos.

Como

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.5)$$

Então,

$$\varepsilon_{11} = \beta \quad (4.6)$$

o que prova que é aplicada uma deformação constante na fronteira $\partial\Psi$ do domínio do material, nos ensaios longitudinais. Em média a deformação também é constante em Ψ , $\langle \varepsilon_{11} \rangle = \beta$.

No caso de um ensaio de corte, para $i = 4$ e realizando o mesmo procedimento, obtém-se:

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \beta & 0 \\ \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

E respetivamente,

$$\begin{cases} u_1 = \beta x_2 \\ u_2 = \beta x_1 \\ u_3 = 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

Logo, pela Eq. (4.5),

$$\varepsilon_{12} = \beta \quad (4.9)$$

Pela Eq. (4.9), verifica-se que também nos ensaios de corte, a deformação aplicada nos elementos é constante na fronteira $\partial\Psi$. Em média a deformação também é constante em Ψ , $\langle \varepsilon_{12} \rangle = \beta$.

Esquematicamente, as condições de fronteira de Dirichlet, para os carregamentos referidos anteriormente, podem ser apresentadas como mostra a figura 4.3. Para maior simplicidade, estas são apresentadas num domínio bidimensional.

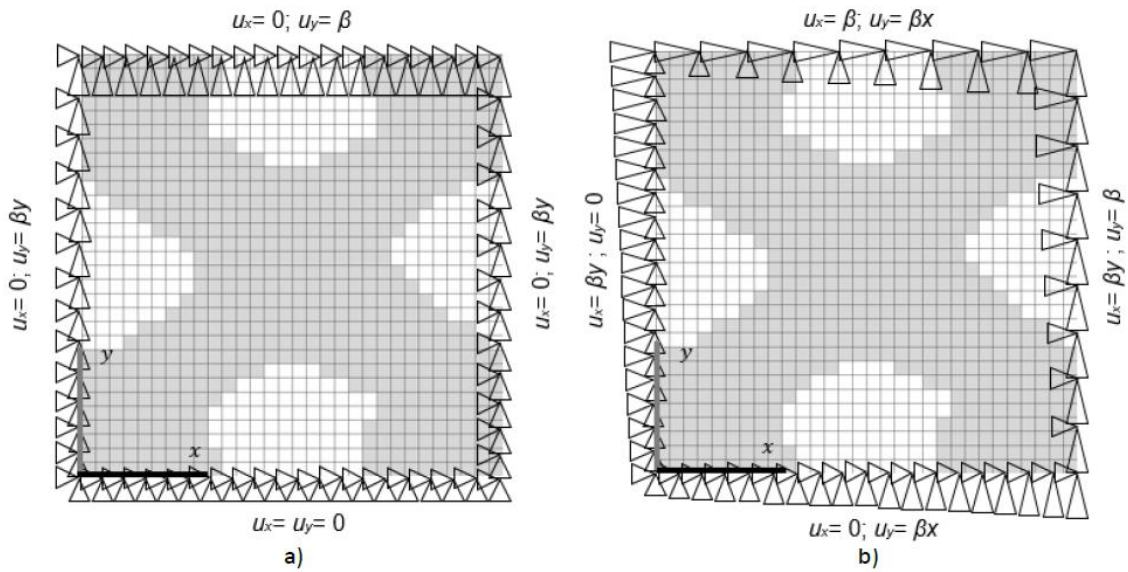


Figura 4.3: Condições de Dirichlet definidas para a) carregamento longitudinal e b) carregamento ao corte. Adaptado de Amiano (2015).

Fazendo o mesmo raciocínio para os restantes estados de carga, obtêm-se as respetivas equações de deslocamento imposto, que podem ser consultadas na tabela 4.2.

Tabela 4.2: Equações de deslocamento imposto para as C.F. de Dirichlet.

i	Θ^i	Equações de deslocamento imposto
1	$\begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = \beta x_1 \\ u_2 = 0 \\ u_3 = 0 \end{cases}$
2	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = 0 \\ u_2 = \beta x_2 \\ u_3 = 0 \end{cases}$
3	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = 0 \\ u_2 = 0 \\ u_3 = \beta x_3 \end{cases}$
4	$\begin{bmatrix} 0 & \beta & 0 \\ \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = \beta x_2 \\ u_2 = \beta x_1 \\ u_3 = 0 \end{cases}$
5	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \\ 0 & \beta & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = 0 \\ u_2 = \beta x_3 \\ u_3 = \beta x_2 \end{cases}$
6	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \beta \\ 0 & 0 & 0 \\ \beta & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = \beta x_3 \\ u_2 = 0 \\ u_3 = \beta x_1 \end{cases}$
7	$\begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = \beta x_1 \\ u_2 = \beta x_2 \\ u_3 = \beta x_3 \end{cases}$
8,9,10	$\begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}; \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = \beta x_1 \\ u_2 = \beta x_2 \\ u_3 = 0 \end{cases}; \begin{cases} u_1 = \beta x_1 \\ u_2 = 0 \\ u_3 = \beta x_3 \end{cases}; \begin{cases} u_1 = 0 \\ u_2 = \beta x_1 \\ u_3 = \beta x_3 \end{cases}$
11,12,13	$\begin{bmatrix} 0 & \beta & \beta \\ \beta & 0 & 0 \\ \beta & 0 & 0 \end{bmatrix}; \begin{bmatrix} 0 & \beta & 0 \\ \beta & 0 & \beta \\ 0 & \beta & 0 \end{bmatrix}; \begin{bmatrix} 0 & 0 & \beta \\ 0 & 0 & \beta \\ \beta & \beta & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = \beta x_2 + \beta x_3 \\ u_2 = \beta x_1 \\ u_3 = \beta x_1 \end{cases}; \begin{cases} u_1 = \beta x_2 \\ u_2 = \beta x_1 + \beta x_3 \\ u_3 = \beta x_2 \end{cases}; \begin{cases} u_1 = \beta x_3 \\ u_2 = \beta x_3 \\ u_3 = \beta x_1 + \beta x_2 \end{cases}$
14	$\begin{bmatrix} 0 & \beta & \beta \\ \beta & 0 & \beta \\ \beta & \beta & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = \beta x_2 + \beta x_3 \\ u_2 = \beta x_1 + \beta x_3 \\ u_3 = \beta x_1 + \beta x_2 \end{cases}$
15	$\begin{bmatrix} \beta & \beta & \beta \\ \beta & \beta & \beta \\ \beta & \beta & \beta \end{bmatrix}$	$\begin{cases} u_1 = \beta x_1 + \beta x_2 + \beta x_3 \\ u_2 = \beta x_1 + \beta x_2 + \beta x_3 \\ u_3 = \beta x_1 + \beta x_2 + \beta x_3 \end{cases}$

No caso dos estados de carga combinados, as condições de Dirichlet não são tão simples de representar no domínio bidimensional. Assim, por exemplo para $i = 10$:

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \beta & \beta \\ \beta & 0 & \beta \\ \beta & \beta & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

Resolvendo o sistema obtém-se,

$$\begin{cases} u_1 = \beta x_2 + \beta x_3 \\ u_2 = \beta x_1 + \beta x_3 \\ u_3 = \beta x_1 + \beta x_2 \end{cases} \quad (4.11)$$

Verifica-se que existem deslocamentos aplicados nas direções u_1 , u_2 e u_3 linearmente dependentes das coordenadas de posição x_2 e x_3 , x_1 e x_3 , x_1 e x_2 respetivamente. Desse modo, fica mais difícil definir esquematicamente, as condições de Dirichlet, em cada nó, sendo impraticável fazê-lo, como anteriormente, num domínio bidimensional. Assim, considerando um domínio cúbico unitário com as arestas numeradas, como está representado na figura 4.4, as equações de deslocamento imposto nas arestas ficam:

$$\textcircled{1} \quad \begin{cases} u_1 = \beta \\ u_2 = \beta x_1 \\ u_3 = \beta x_1 + \beta \end{cases} \quad (4.12)$$

$$\textcircled{2} \quad \begin{cases} u_1 = \beta x_2 \\ u_2 = \beta \\ u_3 = \beta + \beta x_2 \end{cases} \quad (4.13)$$

$$\textcircled{3} \quad \begin{cases} u_1 = 0 \\ u_2 = \beta x_1 \\ u_3 = \beta x_1 \end{cases} \quad (4.14)$$

$$\textcircled{4} \quad \begin{cases} u_1 = \beta x_2 \\ u_2 = 0 \\ u_3 = \beta x_2 \end{cases} \quad (4.15)$$

$$\textcircled{5} \quad \begin{cases} u_1 = 2\beta \\ u_2 = \beta x_1 + \beta \\ u_3 = \beta x_1 + \beta \end{cases} \quad (4.16)$$

$$\textcircled{6} \quad \begin{cases} u_1 = \beta x_2 + \beta \\ u_2 = 2\beta \\ u_3 = \beta + \beta x_2 \end{cases} \quad (4.17)$$

$$\textcircled{7} \quad \begin{cases} u_1 = \beta \\ u_2 = \beta x_1 + \beta \\ u_3 = \beta x_1 \end{cases} \quad (4.18)$$

$$\textcircled{8} \quad \begin{cases} u_1 = \beta x_2 + \beta \\ u_2 = \beta \\ u_3 = \beta x_2 \end{cases} \quad (4.19)$$

$$\textcircled{9} \quad \begin{cases} u_1 = \beta x_3 \\ u_2 = \beta + \beta x_3 \\ u_3 = \beta \end{cases} \quad (4.20)$$

$$\textcircled{10} \quad \begin{cases} u_1 = \beta + \beta x_3 \\ u_2 = \beta + \beta x_3 \\ u_3 = 2\beta \end{cases} \quad (4.21)$$

$$\textcircled{11} \quad \begin{cases} u_1 = \beta x_3 \\ u_2 = \beta x_3 \\ u_3 = 0 \end{cases} \quad (4.22)$$

$$\textcircled{12} \quad \begin{cases} u_1 = \beta + \beta x_3 \\ u_2 = \beta x_3 \\ u_3 = \beta \end{cases} \quad (4.23)$$

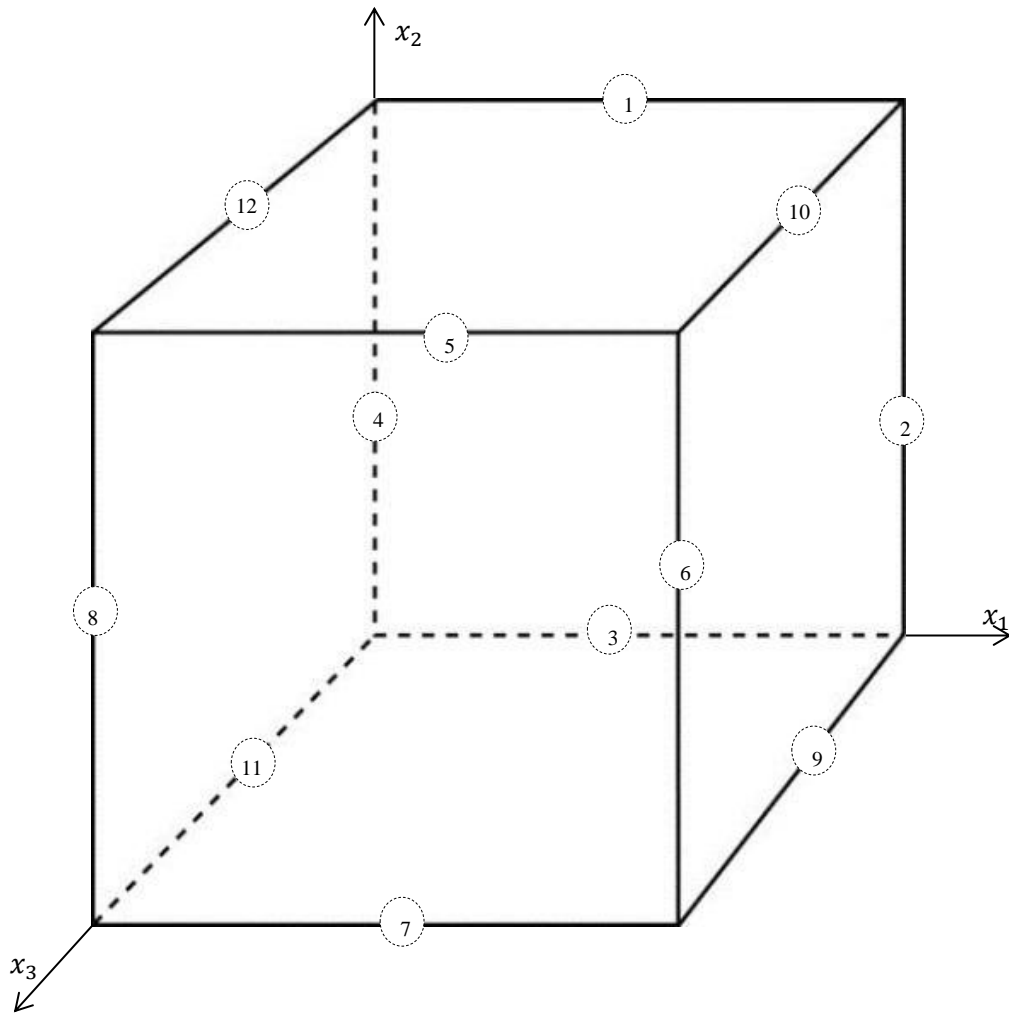


Figura 4.4: Domínio cúbico com arestas numeradas.

Os ensaios com introdução de condições de fronteira de Dirichlet podem ser aplicados tanto a um material compósito $\left(\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1\right)$ como a um material poroso ou celular $\left(\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}\right)$.

4.1.1.2 Condições de Neumann

À semelhança das condições de Dirichlet, as condições de fronteira de Neumann são implementadas da seguinte forma:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}|_{\partial\psi} = \boldsymbol{\Theta}^i \cdot \mathbf{n}|_{\partial\psi} \quad i=1,\dots,15 \quad (4.24)$$

Onde, de maneira semelhante ao ensaio a deformação constante, $\partial\Psi$ é a fronteira do material, σ é o tensor de tensão de Cauchy, \mathbf{n} é o normal ao plano, β é uma constante e Θ^i é definido pela Eq. (4.2). Da mesma forma nestas condições também são realizados seis ensaios independentes (identicamente três longitudinais e três de corte) e 9 ensaios combinados, segundo o índice i no tensor Θ .

A figura 4.2 apresenta as condições de fronteira de Neumann, mais uma vez num domínio bidimensional para maior simplicidade, onde na figura 4.2 a) está representado um ensaio na direção longitudinal y e na figura 4.2 b) um ensaio ao corte no plano xy .

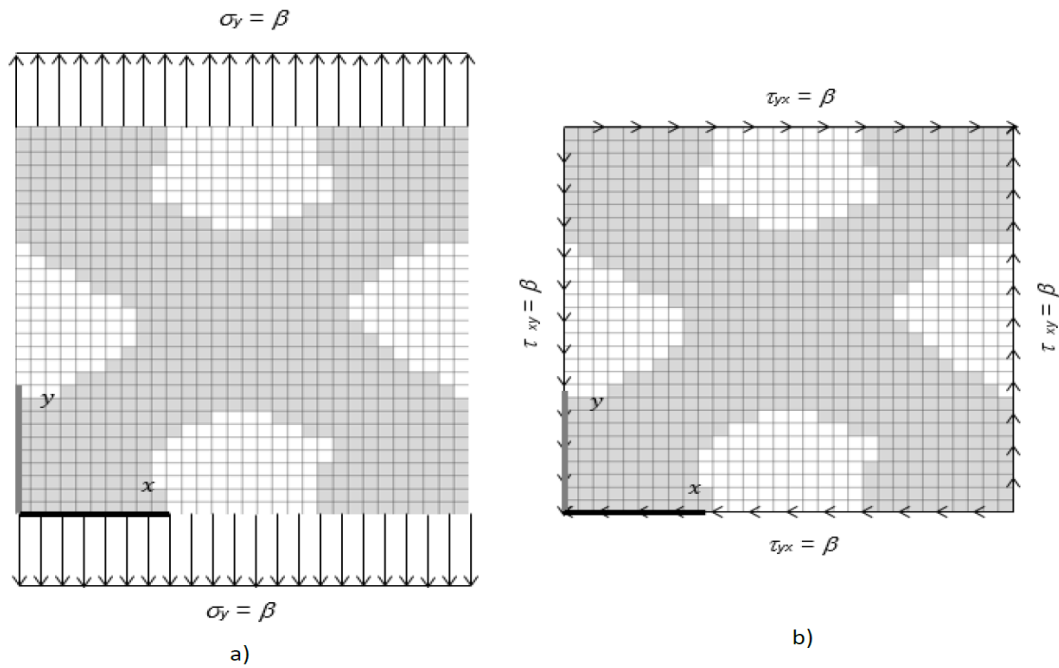


Figura 4.5: Testes numéricos nas condições de Neumann (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). a) Teste longitudinal; b) Teste ao corte. Adaptado de Amiano (2015).

Numericamente, as condições de Neumann foram implementadas em APDL de duas maneiras diferentes, de acordo com o tipo de ensaio. Assim, para carregamentos longitudinais, a tensão constante foi aplicada diretamente utilizando uma função própria do ANSYS que aplica uma tensão normal a uma dada superfície. Por outro lado, para carregamentos em plano de corte, foi necessário recorrer à aplicação de forças nos nós, pois o *software* não permite a aplicação de tensões, em direções paralelas às faces. Logo, e de modo a garantir que a tensão aplicada é constante nas faces, foi realizada uma correção da intensidade das forças em função do número de elementos que pertencem ao nó. Essa correção traduz-se como:

$$F_n = \frac{N_n}{4} \quad (4.25)$$

Assim, a intensidade da força aplicada é estimada segundo a Eq. (4.25), onde F_n representa a força a aplicar em um dado nó n , e N_n é o número de elementos que pertencem ao nó n . Como consequência, para uma dada face, as forças aplicadas nos nós interiores têm valor unitário, nas arestas têm valor 0.5 e nos vértices 0.25.

Visto que os carregamentos ao corte são aplicados numericamente, como foi descrito acima, há que ter em conta que quando se combinam dois carregamentos ao corte diferentes, como por exemplo τ_{xy} e τ_{xz} , vão existir nós, nomeadamente nas arestas e vértices, que por pertencerem a mais que um plano, são influenciados, de forma independente, por esses mesmos carregamentos. A figura 4.6 mostra um cubo unitário com dois carregamentos ao corte combinados e como se pode ver, é aplicada uma força na direção x com sinal negativo, devido ao carregamento xy , e uma força na direção x com sinal positivo, devido ao carregamento xz , nos nós da aresta realçada. Se a intensidade dessas forças for igual, então as forças anulam-se, logo, para esses nós, $F_x = 0$. Posto isto, quando se pretendem combinar dois, ou mais, carregamentos ao corte, foi necessário fazer-se esta correção nas arestas em que há sobreposição de forças.

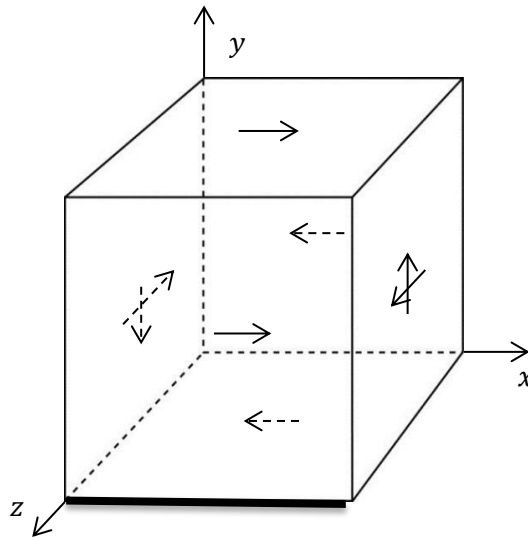


Figura 4.6: Cubo unitário com aplicação de carregamento que combina duas tensões ao corte, no plano xy e xz .

Ao contrário do que sucede na aplicação das condições de Dirichlet, as condições de Neumann foram utilizadas apenas para um baixo rácio de rigidez entre a fase sólida e a fase de vazio, $\left(\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^1\right)$, o que representa um material compósito. Tal foi necessário, pois as condições de Neumann ao serem aplicadas diretamente em elementos de material vazio, provocam uma deformação excessiva, dada a sua baixa rigidez e visto que $\varepsilon = \frac{\sigma}{E}$. Na figura 4.7

é apresentado mais um caso de aplicação das condições de fronteira de Neumann, nomeadamente para o carregamento **Triaxial/Hidroestático** (ver tabela 4.1).

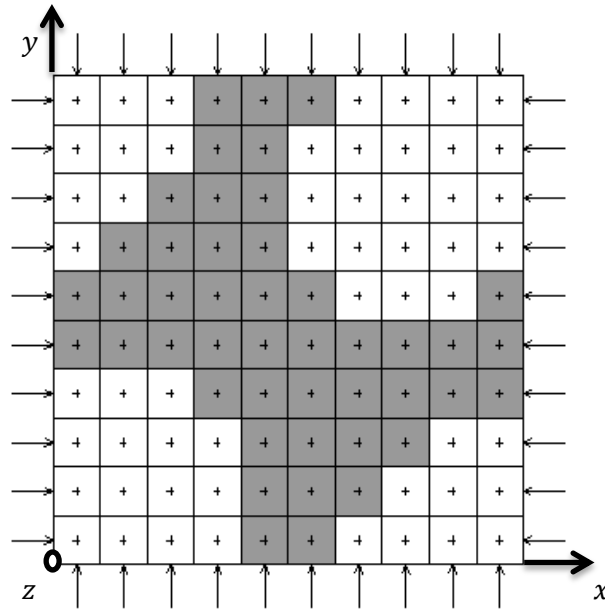


Figura 4.7: Teste numérico com aplicação de condições de fronteira de Neumann, para um estado de carga **triaxial/hidroestático** (combinação de tensões longitudinais). Tensões são aplicadas diretamente nos elementos. Cinzento corresponde a material e branco a vazio.

Outra particularidade que surge aquando da aplicação de C.F. de Neumann são os movimentos de corpo rígido, que devem ser evitados. Por outras palavras, as reações nos apoios devem ser sempre nulas, independentemente do carregamento aplicado. Tal foi conseguido implementando três elementos do tipo SHELL63 no apoio ao cubo de domínio Ψ , para restrições de movimentos de corpo rígido. Os elementos SHELL devem ser o menos rígidos possível, de modo a não interferir, localmente, nos resultados de tensão obtidos ($E_{shell} = 1 \text{ Pa}$). Este é um elemento que possui capacidades de flexão e de membrana e contém seis graus de liberdade em cada nó: translação nas direções x , y e z e rotação em torno de x , y e z . Como está ilustrado na figura 4.8, os elementos SHELL são conectados ao elemento do compósito que está localizado na origem referencial (elemento 1), através dos nós. No nó comum aos elementos são impostas condições de fronteira de movimento que impedem qualquer translação ou rotação.

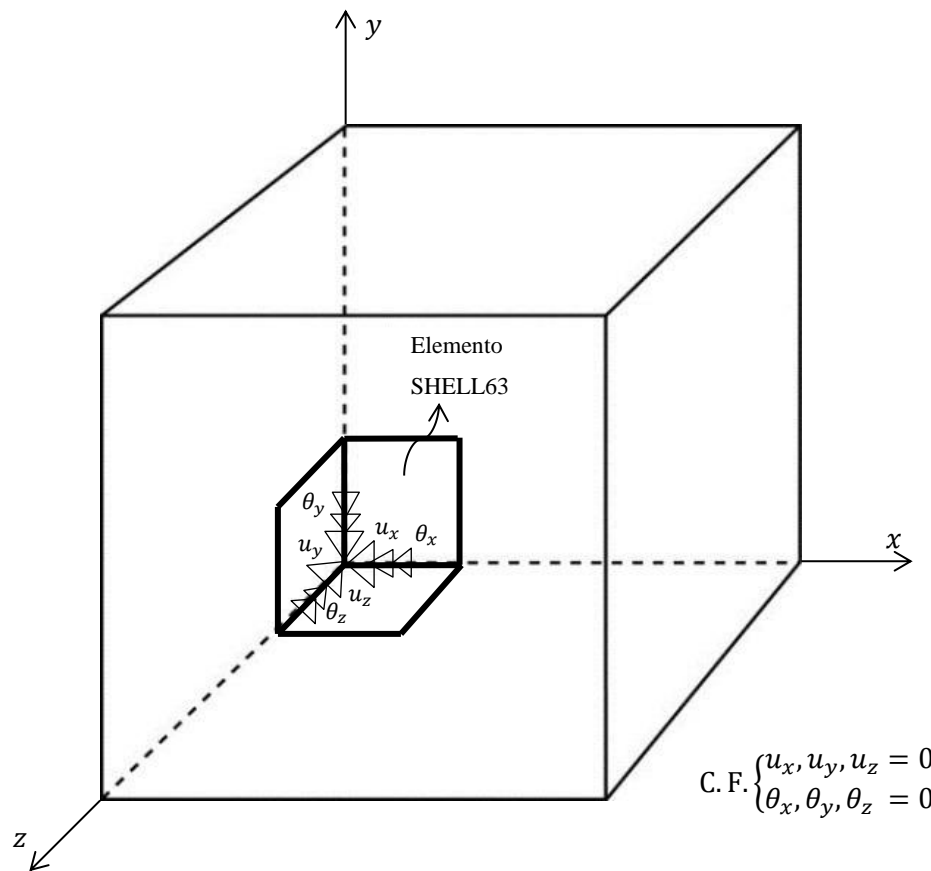


Figura 4.8: Localização dos elementos SHELL utilizados para impedir movimentos de corpo rígido. No nó pertencente à origem são impostas C.F. de deslocamento que impedem qualquer translação ou rotação.

4.2 Pós-processamento

O pós-processamento tem, como referido anteriormente, duas formas distintas, dependendo dos resultados que se pretendem estudar: análise de convergência da tensão (secção 4.2.1) ou análise da periodicidade (secção 4.2.2).

4.2.1 Análise de convergência da tensão

Um dos objetivos desta dissertação é a determinação de campos de tensão em materiais compósitos de microestrutura periódica através da teoria da homogeneização e posterior validação desses resultados. A mesma é feita avaliando os campos de tensão provocados pelos carregamentos, de tensão ou deformação constante, descritos na secção 4.1, em compósitos com diferentes números de repetições da célula base (ver figura 4.9).

O fator de escala n é definido pelo quociente entre a dimensão da estrutura D gerada pela repetição da célula de base unitária e a dimensão dessa mesma célula, $n = \frac{D}{d}$. O domínio do compósito Ψ é sempre um cubo unitário, i.e, $D = 1$, logo n representa o número de vezes que a célula unitária é repetida ao longo de cada direção espacial. O campo de tensão homogeneizado é calculado para um determinado carregamento, de tensão ou deformação constante, e assumindo um número infinito de repetição da célula unitária, $n \rightarrow \infty$, ou seja, não depende do fator de escala. No entanto, na prática tal não se verifica, sendo as propriedades mecânicas da estrutura dependentes do número finito de repetições da célula de base.

Assim, foi realizada uma comparação entre os valores da tensão estimados pela teoria da homogeneização e os valores da tensão obtidos através da realização de ensaios mecânicos com modelos numéricos (com o *software* de elementos finitos ANSYS), para diferentes números de repetição da célula unitária. Nesta dissertação o fator de escala n varia de 1 até 5, como ilustra a figura 4.9.

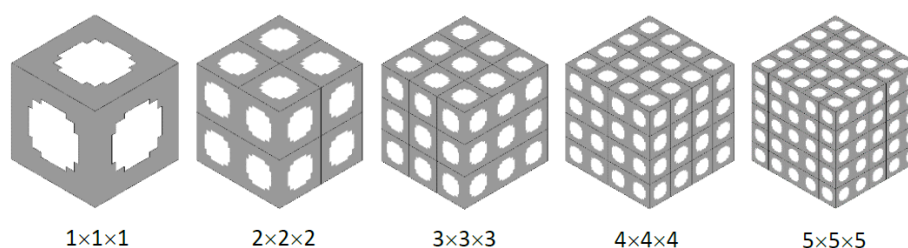


Figura 4.9: Cubo unitário com $n \times n \times n$ repetições da célula unitária.

A leitura dos valores da tensão pelo ANSYS será feita nos elementos da célula de base unitária central como mostra a figura 4.10. É mostrado apenas metade do domínio do compósito Ψ , de forma a se realçar a célula onde as tensões são lidas e serão comparadas com as obtidas pela homogeneização (através do POSTMAT). Pode-se ainda ver que para um fator de escala n par será utilizado uma topologia descentrada. Tal é necessário para se garantir que a topologia da célula unitária extraída do centro do compósito corresponde exatamente aquela avaliada pelo POSTMAT.

Cada célula de base unitária está discretizada por uma malha $10 \times 10 \times 10$ de elementos finitos hexaedros com 8 nós. Isto significa que um total de $1000 \times n^3$ elementos finitos são utilizados no modelo numérico, associados a um fator de escala n .

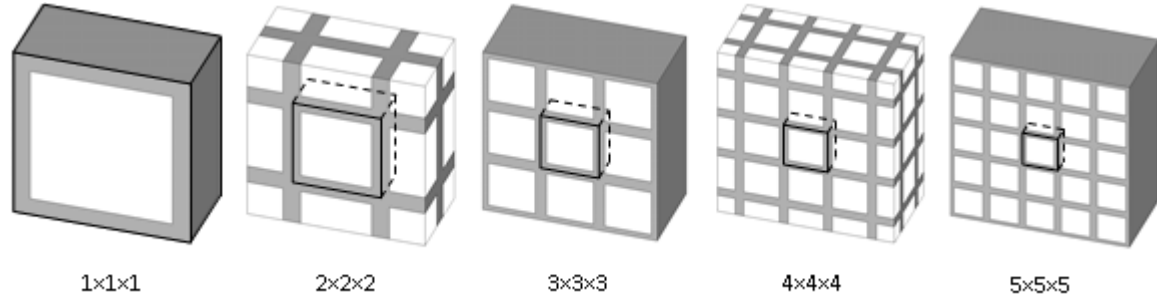


Figura 4.10: Efeitos de escala na célula de base central para um fator de escala n crescente. Apenas metade do volume do compósito Ψ é representado e célula central está realçada. Para $n = 2$ e $n = 4$, a comparação realiza-se na célula descentrada (*shifted*). Adaptado de Coelho *et al* (2016).

Na figura 4.11 é feita uma representação esquemática do *design* descentrado.

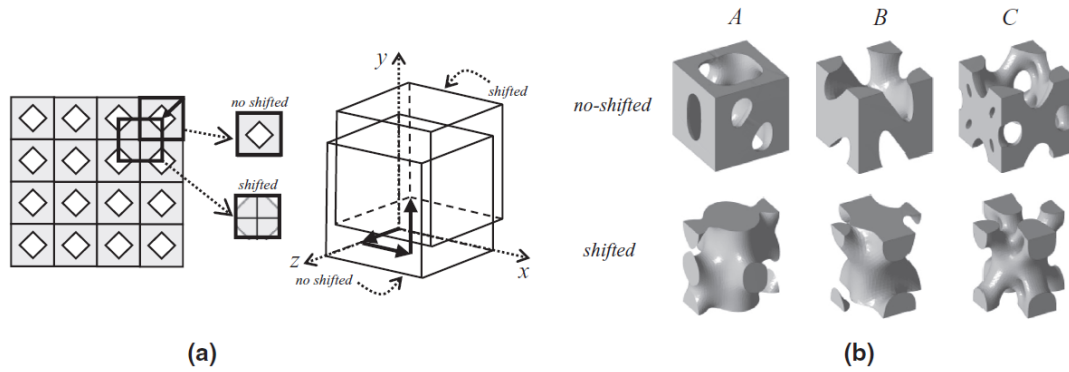


Figura 4.11: (a) Representação esquemática em domínio bidimensional e tridimensional de células de base com topologia descentrada. (b) Topologia normal (em cima) e topologia descentrada (em baixo).

Adaptado de Coelho *et al* (2015).

Os códigos APDL elaborados permitem obter tanto os componentes individuais da tensão como a tensão equivalente de von-Mises em cada nó e elemento da malha de E.F. A tensão equivalente é calculada pelo ANSYS da seguinte forma:

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{1}{2}[(\bar{\sigma}_{11} - \bar{\sigma}_{22})^2 + (\bar{\sigma}_{22} - \bar{\sigma}_{33})^2 + (\bar{\sigma}_{33} - \bar{\sigma}_{11})^2] + 3(\bar{\tau}_{12}^2 + \bar{\tau}_{23}^2 + \bar{\tau}_{13}^2)} \quad (4.26)$$

onde

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^N \sigma_{ij}^k}{N}, \quad i, j = 1, \dots, 3 \quad \text{com } N = 8 \text{ (nº de pontos de Gauss)} \quad (4.27)$$

Por sua vez, o POSTMAT está devidamente adaptado para efetuar estes cálculos, para a tensão equivalente. Ao nível de programação, a seleção dos elementos para recolha dos valores da tensão foi uma tarefa que apresentou algumas dificuldades, devido à ordem pela qual os mesmos estão numerados e pela qual as células de base unitária são geradas. Assim, foi necessário desenvolver um algoritmo que recolhesse esses elementos de forma eficiente, precavesse tanto um número de repetições pares e ímpares, e parametrizado para qualquer dimensão de malha e fator de escala n . Para mais detalhes refira-se ao anexo II.

4.2.2 Análise da periodicidade

Outro dos objetivos desta dissertação é o de avaliar o efeito do fator de escala n na verificação da periodicidade dos campos de tensão obtidos. Neste caso, e para maior simplicidade, avaliam-se as tensões obtidas para um determinado carregamento, em colunas de elementos separadas por um período, Y , num determinado plano do compósito. Na figura 4.12 é mostrado, como exemplo, um compósito com fator de escala $n = 2$, onde são selecionadas duas fileiras de elementos dum plano xy e que distam um período Y entre si. Aqui, à semelhança do que sucede no outro estudo, os códigos APDL permitem obter tanto as componentes individuais da tensão como a tensão equivalente de von-Mises em cada nó e elemento do da malha de E.F.

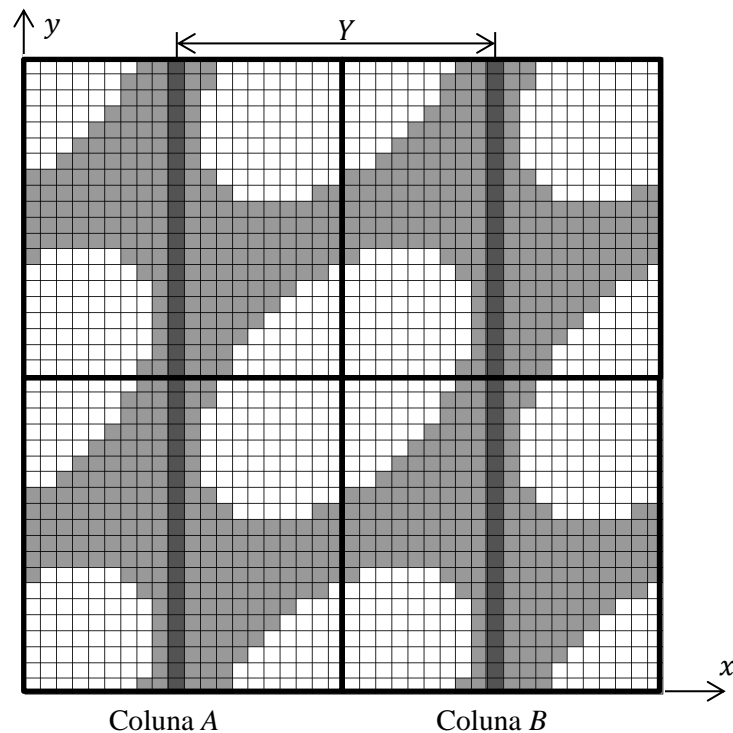


Figura 4.12: Avaliação da periodicidade através da leitura da tensão ao longo de colunas de elementos, num determinado plano xy de um compósito com fator de escala $n = 2$.

A figura 4.13 resume esquematicamente o potencial de cálculo com os códigos APDL desenvolvidos. Em suma, estes permitem obter resultados de tensão (componentes individuais e tensão equivalente), através da aplicação de carregamentos i (ver tabela 4.1), por intermédio de C.F. de Neumann (σ) ou Dirichlet (ε). A tensão é obtida nos elementos e nós de um material compósito (rácio 10) ou celular (rácio 12) com um certo fator de escala n , obtido através da repetição de uma célula de base unitária discretizada por uma malha $N \times N \times N$ e que tem um determinado *design* topológico (obtido com constrangimento de volume ou permeabilidade).

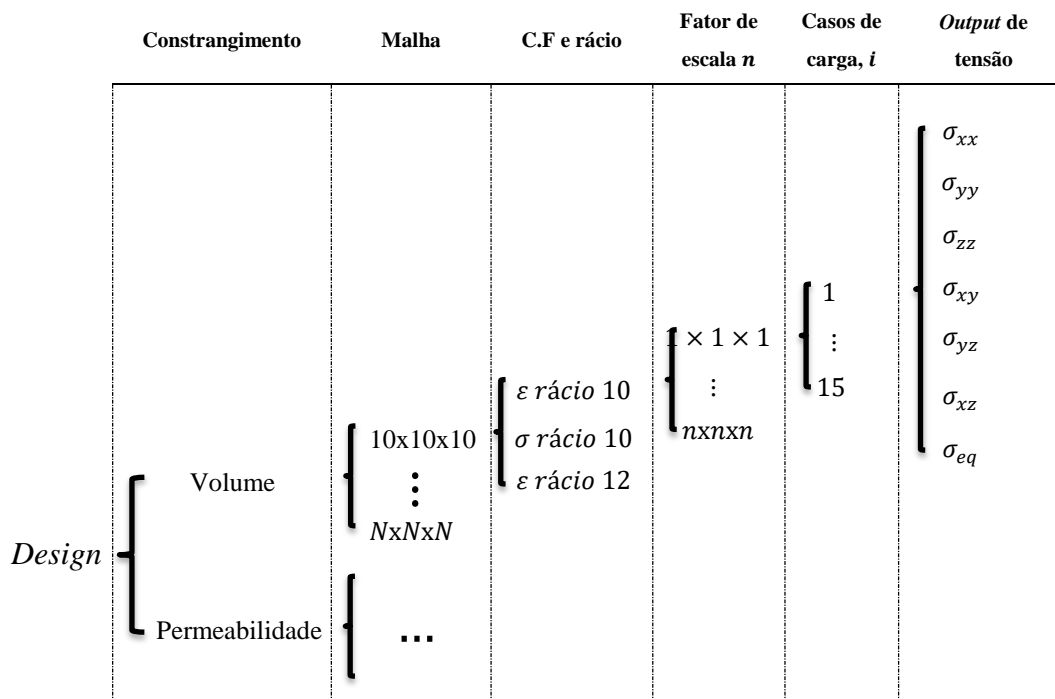


Figura 4.13: Resumo das potencialidades oferecidas pelos códigos APDL desenvolvidos.

5 Resultados

5.1 Topologias ótimas

Nesta dissertação são estudados os materiais compósitos de microestrutura periódica, cuja topologia ótima da célula de base unitária é obtida pelo problema de otimização apresentado anteriormente, Eq. (3.37), tendo-se verificado que a solução ótima depende diretamente do campo de tensões definido, das restrições de projeto utilizadas e do *design* inicial. Logo, para que houvesse uma boa diversidade de topologias ótimas e casos de anisotropia de material (e consequentemente diferentes propriedades elásticas), foram realizadas várias otimizações com diferentes estados de tensão e para constrangimentos quer de volume quer de permeabilidade. Daí, e uma vez que não seria possível cobrir todas as topologias obtidas, foi selecionado um bom conjunto representativo das mesmas.

O material de base da microestrutura é o polycaprolactone (PCL), referido no capítulo 2 (secção 2.2). Este material assume-se como linear e isotrópico, com um módulo de Young $E^0 = 300\text{MPa}$ e um coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$, com base no estudo referido na secção 2.2 (ver secção 2.2; tabela com os resultados pode ser consultada no anexo I). Este valor resulta do cálculo da média dos valores de módulo de rigidez obtidos para cada ensaio realizado.

O conjunto de topologias obtidas está representado na tabela 5.1 e 5.2. Estas possuem informação relativamente ao estado de tensão utilizado para gerar cada topologia ótima quer para constrangimentos de volume quer para permeabilidade. É também apresentado para cada topologia o respetivo estado de anisotropia de material, assim como o parâmetro \mathcal{A} (ver secção 3.5). A gama obtida para valores deste parâmetro mostra que o conjunto de topologias escolhido representa uma boa amostra, face à infinidade de possíveis topologias (anisotropias) de material que se podiam gerar.

Resultados

Tabela 5.1: Estados de tensão normais utilizados e topologias ótimas correspondentes para constrangimentos de volume e de permeabilidade. Representação gráfica da anisotropia e correspondente valor de \mathcal{A} [Pa].

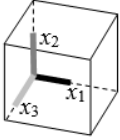
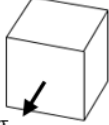
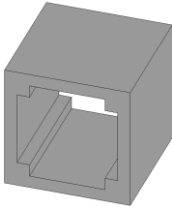
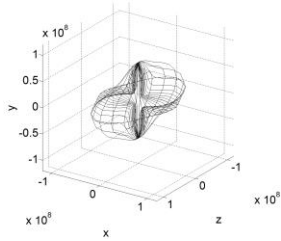
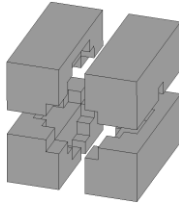
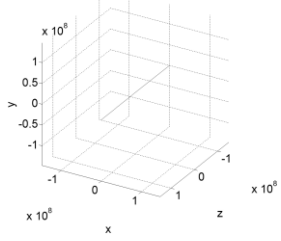
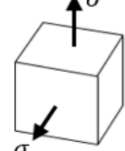
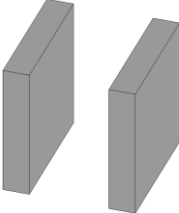
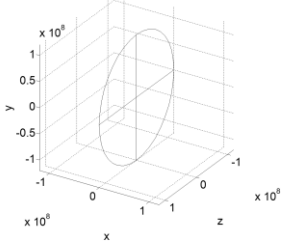
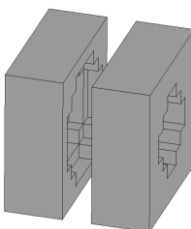
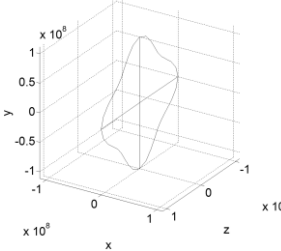
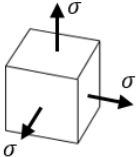
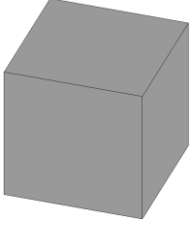
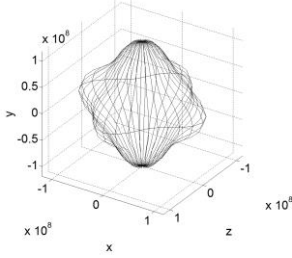
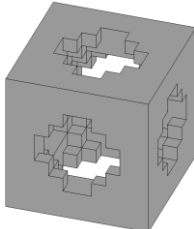
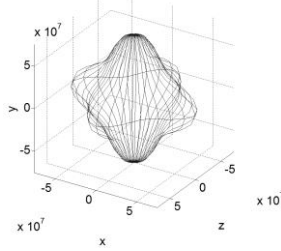
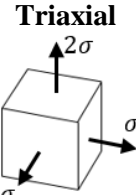
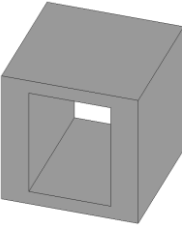
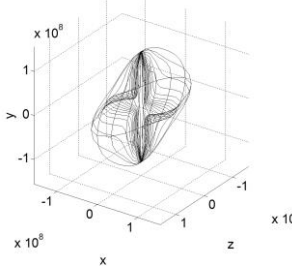
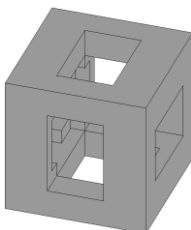
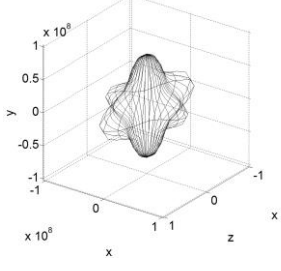
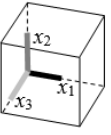
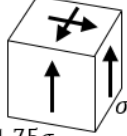
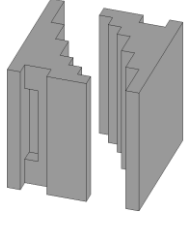
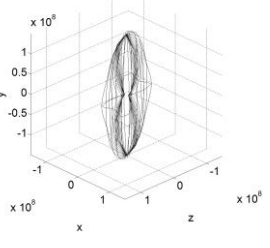
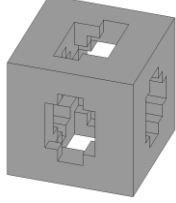
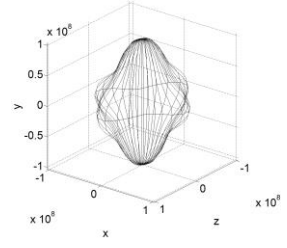
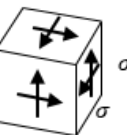
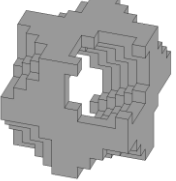
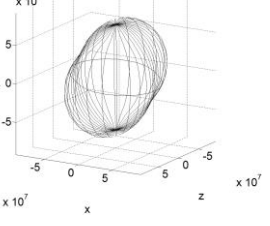
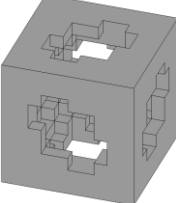
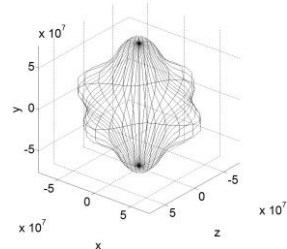
Estado de tensão  $(\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}, \sigma_{23}, \sigma_{13})$	Constrangimento de volume $V^* = 50\%$		Constrangimento de permeabilidade $k^* = 30\%$	
	Topologia	Medida de anisotropia	Topologia	Medida de anisotropia
Uniaxial  $(0; 0; \sigma; 0; 0; 0)$		$\mathcal{A} = 0.4010$ 		$\mathcal{A} = 2.0000$ 
Biaxial  $(0; \sigma; \sigma; 0; 0; 0)$		$\mathcal{A} = 0.9359$ 		$\mathcal{A} = 0.9537$ 
Hidrostático  $(\sigma; \sigma; \sigma; 0; 0; 0)$		$\mathcal{A} = 0.1659$ 		$\mathcal{A} = 0.2242$ 
Triaxial  $(\sigma; 2\sigma; 3\sigma; 0; 0; 0)$		$\mathcal{A} = 0.4337$ 		$\mathcal{A} = 0.3356$ 

Tabela 5.2: Estados de tensão ao corte utilizados e topologias ótimas correspondentes para constrangimentos de volume e de permeabilidade. Representação gráfica da anisotropia e correspondente valor de \mathcal{A} [Pa].

Estado de tensão  $(\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}, \sigma_{23}, \sigma_{13})$	Constrangimento de volume $V^* = 50\%$		Constrangimento de permeabilidade $k^* = 30\%$	
	Topologia	Medida de anisotropia	Topologia	Medida de anisotropia
Corte2  $(0; 0; 0; \sigma; 1.75\sigma; 0)$		$\mathcal{A} = 0.6412$ 		$\mathcal{A} = 0.2412$ 
Corte3  $(0; 0; 0; \sigma; \sigma; \sigma)$		$\mathcal{A} = 0.3179$ 		$\mathcal{A} = 0.2608$ 

Como se pode ver, o estado de anisotropia das topologias selecionadas pertencem a uma gama que tem como valor mais baixo, $\mathcal{A}=0.1659$, (para o caso **Hidrostático** com constrangimento de volume) e como valor mais alto, $\mathcal{A}=2$, (para o caso **Uniaxial** com constrangimento de permeabilidade). De notar, também, que para alguns estados de tensão (**Biaxial**, **Hidrostático**, **Triaxial**) não se verifica uma grande diferença na medida de anisotropia medida, quando se utilizam constrangimentos de volume ou de permeabilidade.

Na tabela 5.3 são apresentados, a título de exemplo, na forma reduzida (matricial) e pela ordem apresentada na Eq. (3.16) alguns exemplos de tensores de elasticidade homogeneizados \mathbf{E}^H e pelas razões descritas no parágrafo anterior serão apenas apresentados para os cinco casos: **Hidrostático**, **Corte3**, **Corte2** (com constrangimento de volume, $V^* = 50\%$), **Uniaxial** e **Biaxial** (com constrangimento de permeabilidade, $k^* = 30\%$). Estes tensores foram obtidos para o caso de material celular $\left(\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}\right)$.

Resultados

Tabela 5.3: Exemplo de tensores de elasticidade homogeneizados, \mathbf{E}^H para material celular ($\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}$).

Uniaxial ($k^* = 30\%$) $\begin{bmatrix} 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & 147.07 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & & & 0.00 & 0.00 \\ & & & & & 0.00 \end{bmatrix}$ <p style="text-align: center;"><i>SYM</i></p>	Biaxial ($k^* = 30\%$) $\begin{bmatrix} 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & 116.73 & 25.33 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & 116.73 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & & & 28.82 & 0.00 \\ & & & & & 0.00 \end{bmatrix}$ <p style="text-align: center;"><i>SYM</i></p>	Hidrostático ($V^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 132.57 & 34.04 & 34.04 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & 132.57 & 34.04 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & 132.57 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & & 29.48 & 0.00 & 0.00 \\ & & & & 29.48 & 0.00 \\ & & & & & 29.48 \end{bmatrix}$ <p style="text-align: center;"><i>SYM</i></p>
Corte2 ($V^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 32.71 & 17.95 & 27.34 & 0.00 & 0.00 & 27.83 \\ & 166.04 & 39.77 & 0.00 & 0.00 & 16.57 \\ & & 105.72 & 0.00 & 0.00 & 27.53 \\ & & & 22.80 & 16.08 & 0.00 \\ & & & & 43.03 & 0.00 \\ & & & & & 29.68 \end{bmatrix}$ <p style="text-align: center;"><i>SYM</i></p>	Corte3 ($V^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 93.12 & 35.63 & 35.63 & 11.22 & 1.82 & 11.22 \\ & 93.12 & 35.63 & 11.22 & 11.22 & 1.82 \\ & & 93.12 & 1.82 & 11.22 & 11.22 \\ & & & 31.07 & 7.85 & 7.85 \\ & & & & 31.07 & 7.85 \\ & & & & & 31.07 \end{bmatrix}$ <p style="text-align: center;"><i>SYM</i></p>	

5.2 Efeitos de escala

5.2.1 Análise de convergência de tensão

Nesta secção serão apresentados os resultados relativos à análise da convergência dos campos de tensão calculados pela teoria da homogeneização e por simulação numérica de ensaios mecânicos normalizados, no domínio da célula unitária central. Como foi explicado no capítulo 4 os resultados fornecidos pela teoria da homogeneização são obtidos através do código POSTMAT que são comparados diretamente com os resultados obtidos pelo ANSYS. Ambos permitem ler os componentes individuais do tensor das tensões assim como a tensão Equivalente de von-Mises em cada nó e elemento. Por uma questão de simplicidade na avaliação da convergência será considerado o valor da tensão equivalente no elemento. Este é calculado como foi explicado no capítulo 4, Eq. (4.26).

Será, portanto, avaliado o desvio entre os resultados obtidos pelo ANSYS e pelo POSTMAT, de acordo com:

$$\text{Desvio [\%]} = \frac{\sigma_{eq}^{\text{ANSYS}} - \sigma_{eq}^{\text{POSTMAT}}}{\sigma_{eq}^{\text{POSTMAT}}} * 100 \quad (5.1)$$

Este desvio é avaliado em cada elemento finito da célula de base unitária central (como explicado no capítulo 4). Assim, para a malha $10 \times 10 \times 10$ considerada existem 1000 pontos de dados a serem representados graficamente. No entanto, por questões de simetria na distribuição das densidades para as topologias consideradas, os pontos de interesse são apenas 500. Primeiro serão exibidos os gráficos que mostram o desvio nesses pontos, para um fator de escala n

crescente que varia de 1 a 5. De seguida, é apresentada uma representação gráfica que resume estatisticamente os anteriores em termos de média e desvio padrão e que será acompanhada, para uma melhor interpretação da mesma, de uma tabela que contém esses mesmos valores, para além dos valores máximos e mínimos de desvio. Para não sobrecarregar este trabalho, os gráficos que mostram o desvio na tensão serão apenas apresentados para um conjunto representativo de topologias. Serão estas: **Hidrostático** (com constrangimento de volume e permeabilidade) e **Corte3** (com constrangimento de volume). Os gráficos que fazem o resumo estatístico serão apresentados para essas mesmas topologias e também para as seguintes: **Corte3** e **Triaxial** (com constrangimento de permeabilidade) e **Corte2**, **Biaxial** e **Uniaxial** (com constrangimento de volume). Decidiu-se também aqui não apresentar todos os resultados pois algumas topologias têm distribuições de densidades e medidas de anisotropia semelhantes, como por exemplo **Hidrostático** e **Corte2** (com constrangimento de permeabilidade). Por sua vez, para os casos **Uniaxial** e **Biaxial**, como se tratam de estados de carga simples, apresenta-se apenas um exemplo para cada. Os resultados para **Corte2** com permeabilidade devem ser consultados no anexo III.

Nas figuras 5.1 a 5.9 são apresentados, nos primeiros cinco gráficos, os desvios lidos na tensão para as topologias especificadas e pode-se ler no eixo das abcissas o número do elemento (1 a 500) e no eixo das ordenadas o desvio respetivo [%]. Por último é apresentado o resumo estatístico onde se pode ler no eixo das abcissas o número de repetições da célula de base unitária nas três direções espaciais e no eixo das ordenadas os valores da média e desvio padrão [%]. Nas figuras 5.10 a 5.14 são apresentados os resultados para as restantes microestruturas escolhidas, mas apenas em termos de média e desvio padrão, assim como as tabelas respetivas. O desvio padrão é calculado aqui pela seguinte equação:

$$s [\%] = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\sigma_i - \bar{\sigma})^2} \quad (5.2)$$

Em que $\bar{\sigma}$ e N são a tensão média e o número de elementos finitos da célula de base ($N = 1000$), respetivamente.

Primeiro serão tratados os resultados para um material compósito $\left(\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^1\right)$, com condições de fronteira de Neumann e Dirichlet, seguindo-se os resultados para um material celular $\left(\frac{E_{Mat1}}{E_{Mat2}} = 10^{12}\right)$ com condições de fronteira de Dirichlet. Neste último caso as tensões lidas nos elementos que representam o vazio são teoricamente nulas, pelo que o cálculo do desvio para esses elementos não faz sentido e os mesmos serão ignorados. Por sua vez, para um material compósito é feita a distinção entre o desvio lido nos elementos do material 1 (pontos

Resultados

negros nos gráficos) e do material 2 (pontos brancos nos gráficos). Esta forma de apresentar os resultados é particularmente útil, pois permite concluir que os maiores desvios são lidos, tipicamente, nos elementos em que o valor da tensão é mais pequeno (material 2). Nas regiões em que o valor da tensão é mais alto ou crítico (material 1), os valores fornecidos quer pelo ANSYS quer pelo POSTMAT apresentam desvios inferiores. Esta conclusão é relevante porque, na prática e ao nível de projeto, os resultados obtidos de tensão máxima através do POSTMAT devem se comparar com a tensão limite de cedência do material. A importância das fases do compósito no desvio são mais notórias para fatores de escala baixos n (normalmente entre 1 e 3). Para $n \geq 4$, os desvios lidos no material 2 acabam por ser tão grandes quanto os lidos no material e encontram-se, na maior parte, abaixo dos 2% o que mostra uma boa convergência (ver figuras 5.1e, 5.2e).

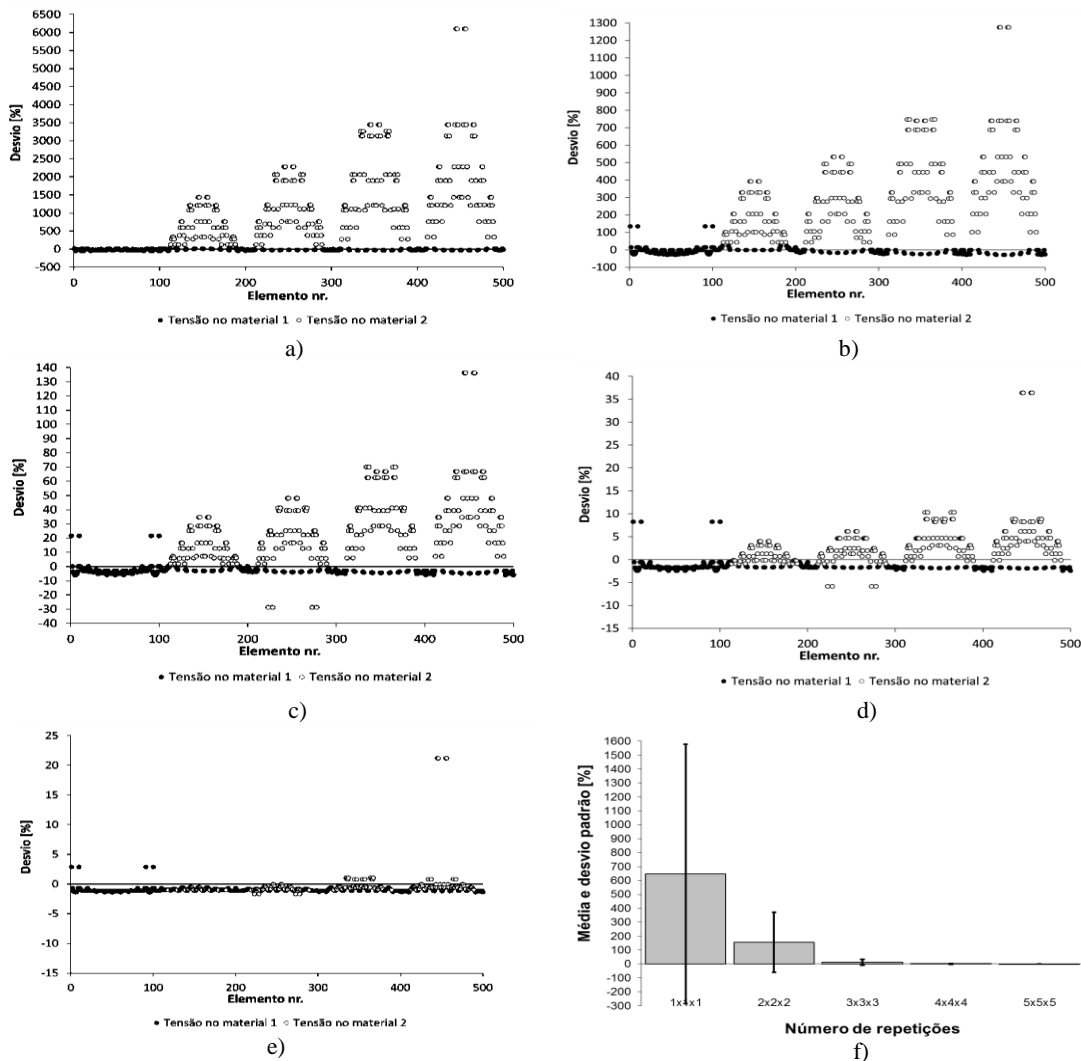


Figura 5.1: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Hidrostático** com constrangimento de volume e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Neumann. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) 1×1×1; b) 2×2×2; c) 3×3×3; d) 4×4×4; e) 5×5×5; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

Aqui, inclusive para um fator de escala alto n são obtidos desvios altos em apenas quatro elementos (445, 446, 455, 456) chegando aos 22%. Estes estão localizados no centro da célula unitária de domínio Y (material 2) e o seu valor de tensão (na ordem de 10^2) é o mínimo obtido quer pelo POSTMAT quer pelo ANSYS. De fato, os maiores valores de tensão estão na ordem de 10^6 . Estes valores são entendidos aqui como *outliers* e são excluídos do cálculo da média e desvio padrão.

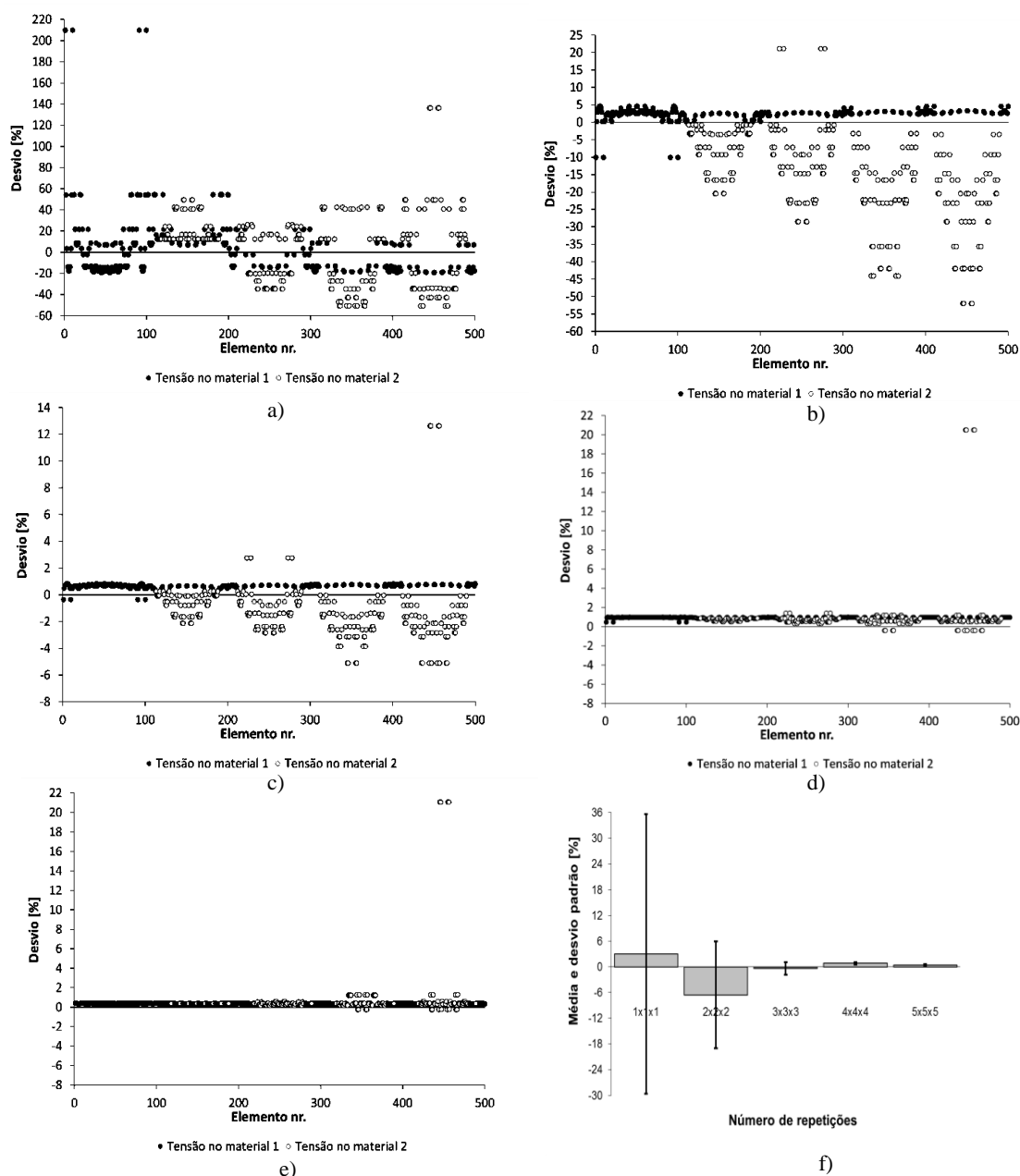


Figura 5.2: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Hidrostático** com constrangimento de volume e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) $1 \times 1 \times 1$; b) $2 \times 2 \times 2$; c) $3 \times 3 \times 3$; d) $4 \times 4 \times 4$; e) $5 \times 5 \times 5$; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

Resultados

Analisando agora o material celular, as tensões são nulas (e.g 10^{-6}) nos elementos que modelam o vazio, logo estas são ignoradas no cálculo da média e do desvio padrão. Devido a esta simplificação percebe-se uma redução mais rápida no valor da média com o aumento do fator de escala. Os valores de *min*, *max* e da média que se encontram na tabela 5.4 estão todos abaixo de 1% para $n = 5$ o que é bastante bom, para um fator de escala tão baixo.

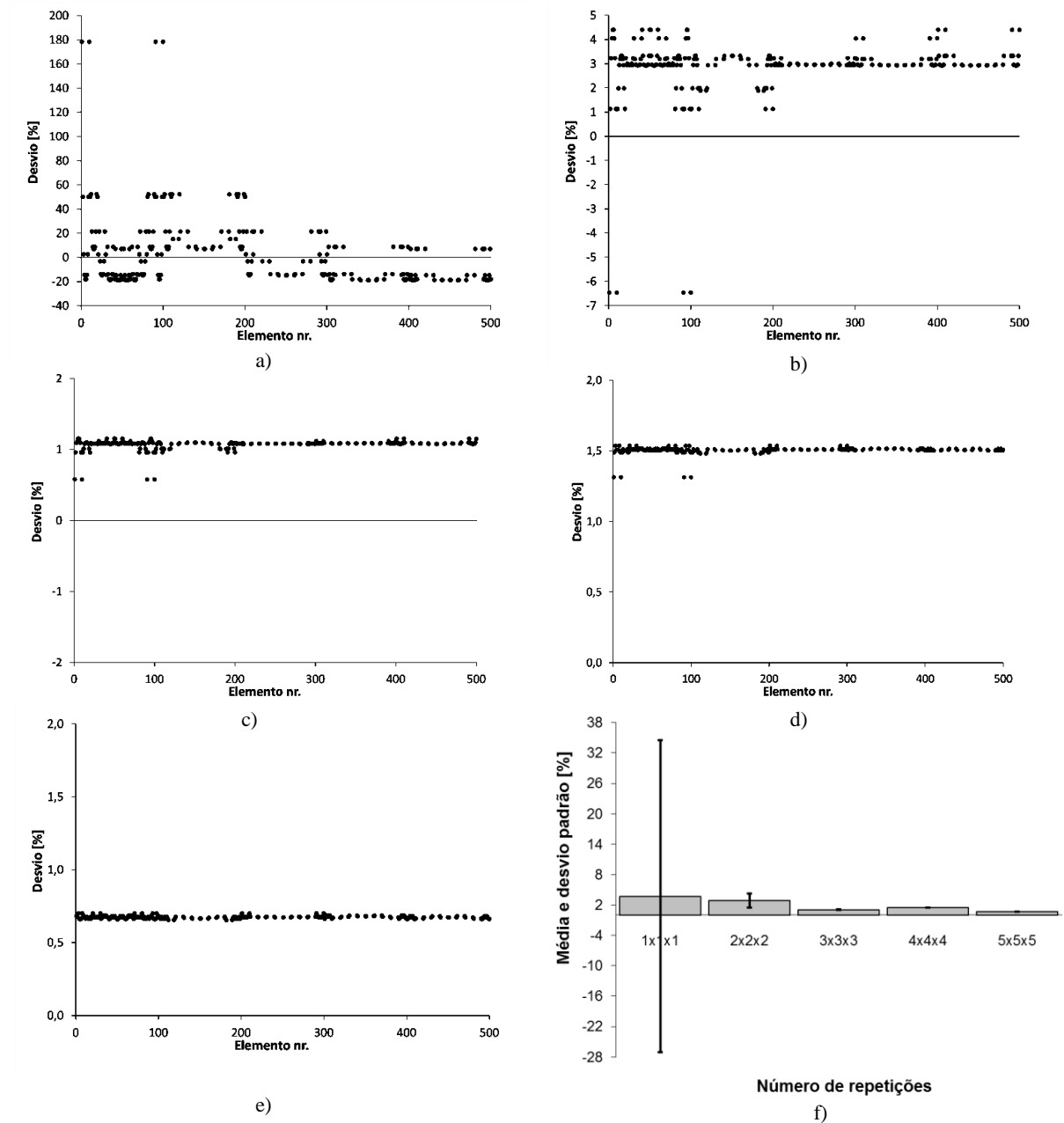


Figura 5.3: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Hidrostático** com constrangimento de **volume** e material celular $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$ com C.F. de Dirichlet. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) 1x1x1; b) 2x2x2; c) 3x3x3; d) 4x4x4; e) 5x5x5; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

Tabela 5.4: Resumo estatístico dos desvios representados nas figuras 5.1 a 5.3. Média \bar{e} , desvio padrão s e desvios extremos (max e min) são apresentados [%].

C.F.	Rácio	Medidas	1×1×1	2×2×2	3×3×3	4×4×4	5×5×5
Neumann	10 ¹	max	3445,707	747,230	70,011	10,301	2,872
		\bar{e}	647,289	156,114	11,965	0,659	-0,836
		min	-47,988	-28,788	-28,786	-5,818	-1,665
		s	930,933	215,734	20,560	3,174	0,540
Dirichlet	10 ¹	max	209,803	21,159	2,770	1,413	1,282
		\bar{e}	2,994	-6,564	-0,421	0,805	0,389
		min	-50,748	-44,030	-5,102	-0,391	-0,226
		s	32,650	12,517	1,474	0,274	0,196
	10 ¹²	max	178,462	4,407	1,154	1,536	0,701
		\bar{e}	3,697	2,846	1,072	1,504	0,675
		min	-18,911	-6,465	0,581	1,314	0,656
		s	30,799	1,351	0,073	0,026	0,009

Nas figuras 5.4 a 5.6 estão apresentados os resultados para o caso **Hidroestático** (com constrangimento de permeabilidade). Como seria de esperar para o material compósito, os valores mais altos do desvio são lidos para o material fraco (material 2), com maior evidência quando são aplicadas C.F. de Neumann e para um fator de escala $n \leq 2$ (ver figuras 5.4a e 5.4b). Para $n > 2$ os valores lidos no material 2 aproximam-se progressivamente dos do material 1, tanto para C.F. de Neumann como Dirichlet, e podem-se ver quatro pontos discrepantes (1, 10, 91 e 100) pertencentes ao material 1, mas com muito menos influência do que no caso **Hidroestático** (com constrangimento de volume). De fato, para $n = 5$ os valores de desvio estão todos compreendidos entre 0 e -1,2% para C.F. de Neumann e 0 e 1,2% para C.F. de Dirichlet, sendo os valores máximos lidos de -1,124% e 2,018% respetivamente. Analisando o material celular, também a partir de $n > 2$ se evidenciam os quatro pontos discrepantes referidos anteriormente (ver figuras 5.6b, a 5.6e) e nota-se uma convergência mais rápida que no caso do material compósito. Para $n = 5$ os valores de desvio estão todos abaixo de 2,6 %.

Relativamente aos valores do desvio padrão, estes comportam-se de forma regular, isto é, decrescem quando se aumenta o fator de escala para os três casos.

Resultados

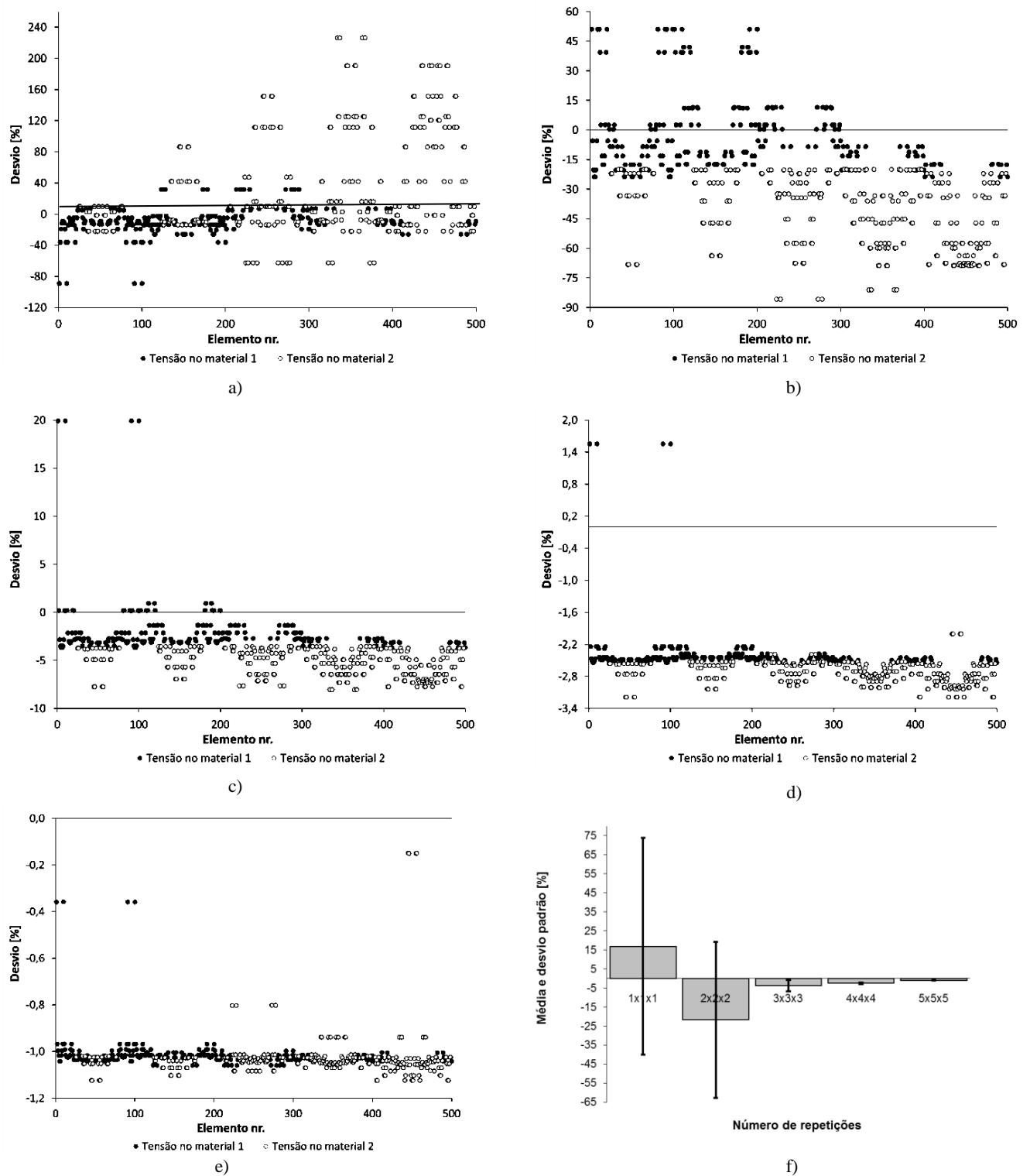


Figura 5.4: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Hidrostático** com constrangimento de permeabilidade e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Neumann. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) 1x1x1; b) 2x2x2; c) 3x3x3; d) 4x4x4; e) 5x5x5; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

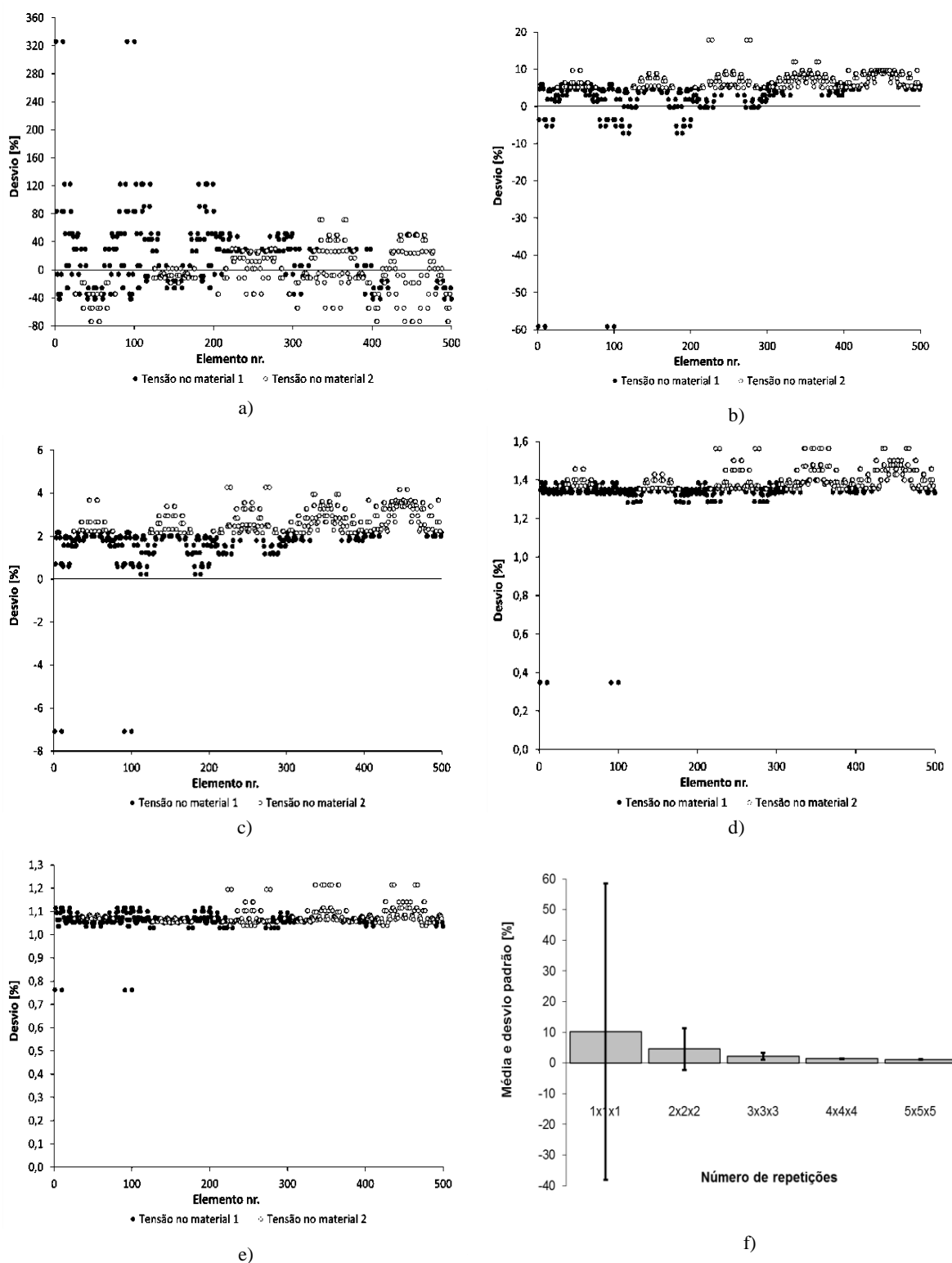


Figura 5.5: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Hidrostático** com constrangimento de permeabilidade e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) $1 \times 1 \times 1$; b) $2 \times 2 \times 2$; c) $3 \times 3 \times 3$; d) $4 \times 4 \times 4$; e) $5 \times 5 \times 5$; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

Resultados

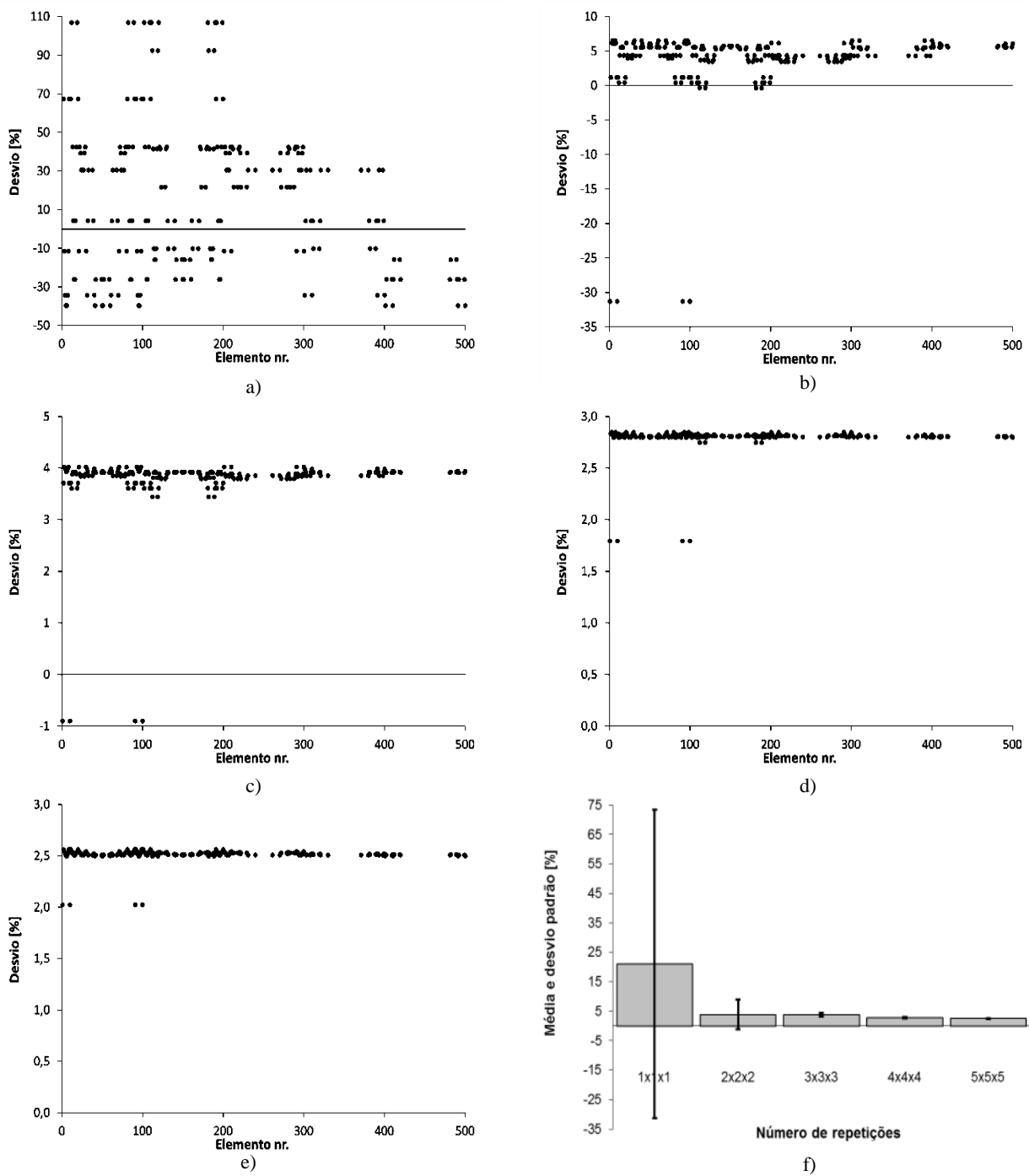


Figura 5.6: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Hidrostático** com constrangimento de **permeabilidade** e material celular $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$ com C.F. de Dirichlet. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) 1x1x1; b) 2x2x2; c) 3x3x3; d) 4x4x4; e) 5x5x5; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

Tabela 5.5: Resumo estatístico dos desvios representados nas figuras 5.4 a 5.6. Média \bar{e} , desvio padrão s e desvios extremos (max e min) são apresentados [%].

C.F.	Rácio	Medidas	1×1×1	2×2×2	3×3×3	4×4×4	5×5×5
Neumann	10 ¹	max	226,545	311,567	19,904	1,553	0,105
		\bar{e}	16,848	-21,736	-3,780	-2,573	-1,018
		min	-89,243	-85,761	-8,053	-3,188	-1,124
		s	56,905	41,009	2,897	0,431	0,105
Dirichlet	10 ¹	max	326,082	17,824	4,275	2,368	2,018
		\bar{e}	10,235	4,567	2,239	1,379	1,080
		min	-73,878	-59,151	-7,092	0,140	0,095
		s	48,396	6,792	1,160	0,140	0,095
	10 ¹²	max	283,365	6,511	4,021	2,847	2,561
		\bar{e}	21,022	3,846	3,781	2,794	2,512
		min	-39,732	-31,276	-0,902	0,136	0,068
		s	52,349	5,028	0,641	0,136	0,068

Nas figuras 5.7 a 5.9 estão apresentados os resultados para o caso **Corte3** (com constrangimento de volume). Aqui percebe-se, para os dois casos de material, uma maior dispersão na nuvem de pontos. No caso do material compósito os valores de desvio mais altos encontram-se, mais uma vez, nos elementos referentes ao material fraco (material 2), tanto para C.F. de Neumann como de Dirichlet, e tal é notório para todos os fatores de escala estudados (ver figuras 5.7a a 5.7e e 5.8a a 5.8e). Para um fator de escala $n = 1$ os valores de desvio para C.F. de Dirichlet são manifestamente mais baixos, ainda que, para ambos os casos a convergência seja muito boa e rápida. Para $n = 5$ os valores de desvio estão compreendidos entre -0,4 e 2% para C.F. de Neumann e abaixo de 0,2% para C.F. de Dirichlet, sendo os valores máximos lidos de 1,915% e 0,168% respetivamente (ver tabela 5.6). No caso do material celular nota-se uma convergência mais rápida e valores de desvio mais baixos para um fator de escala $n = 1$ (abaixo de 20%), relativamente ao caso do material compósito com C.F. de Neumann e não tão evidente relativamente ao material compósito com C.F. de Dirichlet. Para $n = 5$ os valores do desvio estão todos na ordem de 0,2% sendo o valor máximo de desvio de 0,234% (ver tabela 5.6). Através da tabela 5.6 percebe-se, ainda, que o valor do desvio padrão baixa com o aumento do fator de escala, para os três casos.

Resultados

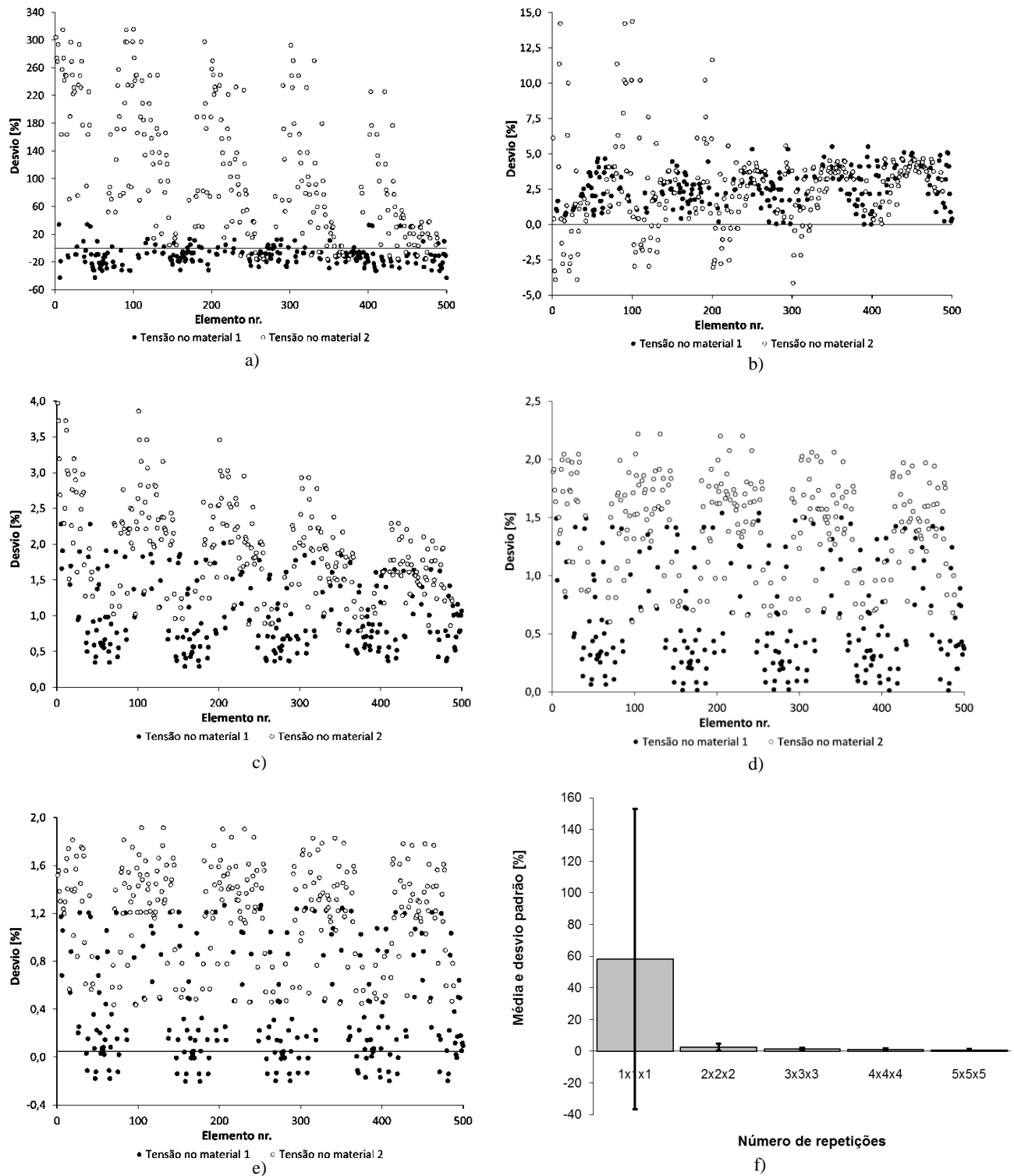


Figura 5.7: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Corte3** com constrangimento de **volume** e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Neumann. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) 1x1x1; b) 2x2x2; c) 3x3x3; d) 4x4x4; e) 5x5x5; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

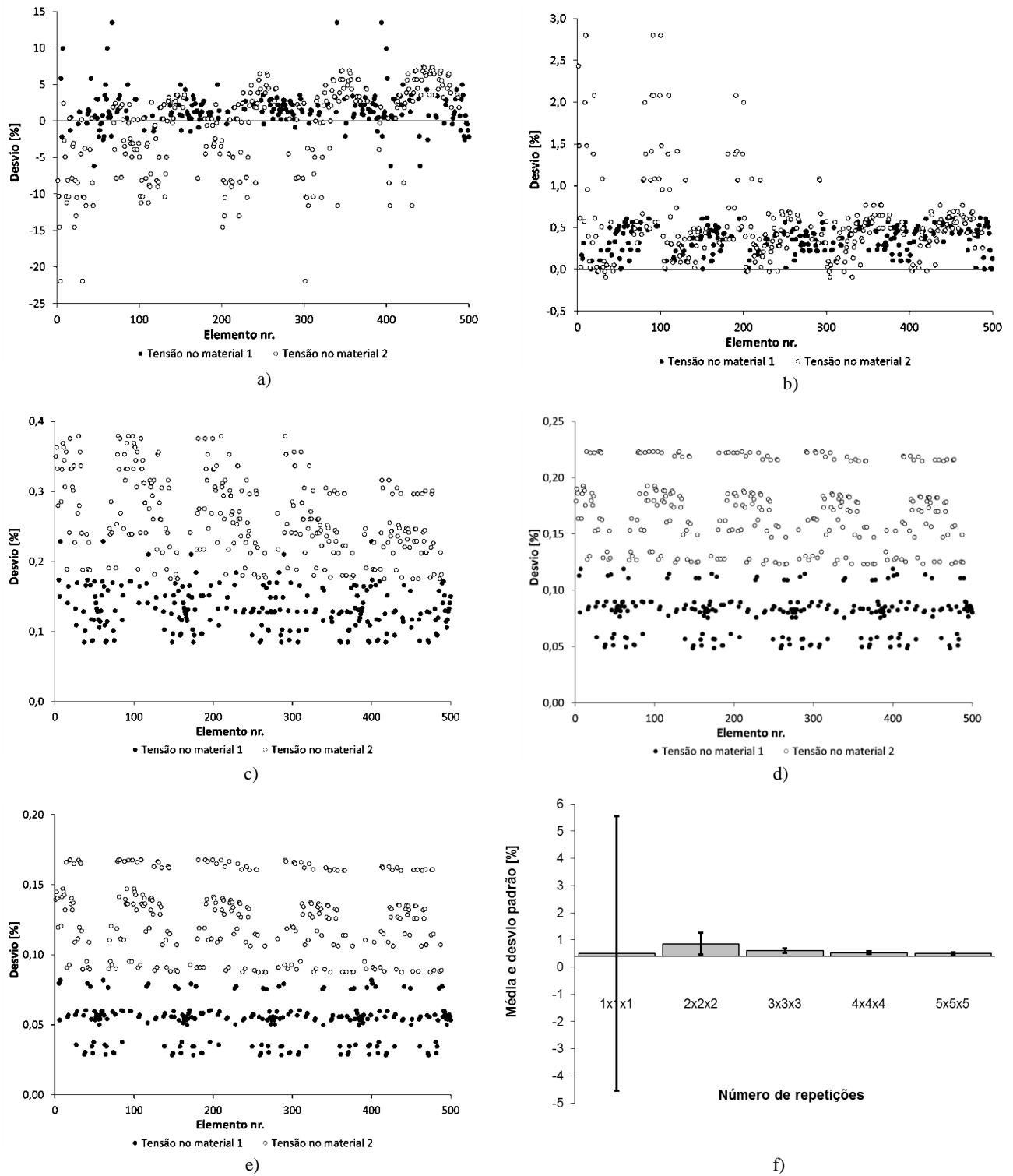


Figura 5.8: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Corte3** com constrangimento de **volume** e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) 1×1×1; b) 2×2×2; c) 3×3×3; d) 4×4×4; e) 5×5×5; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

Resultados

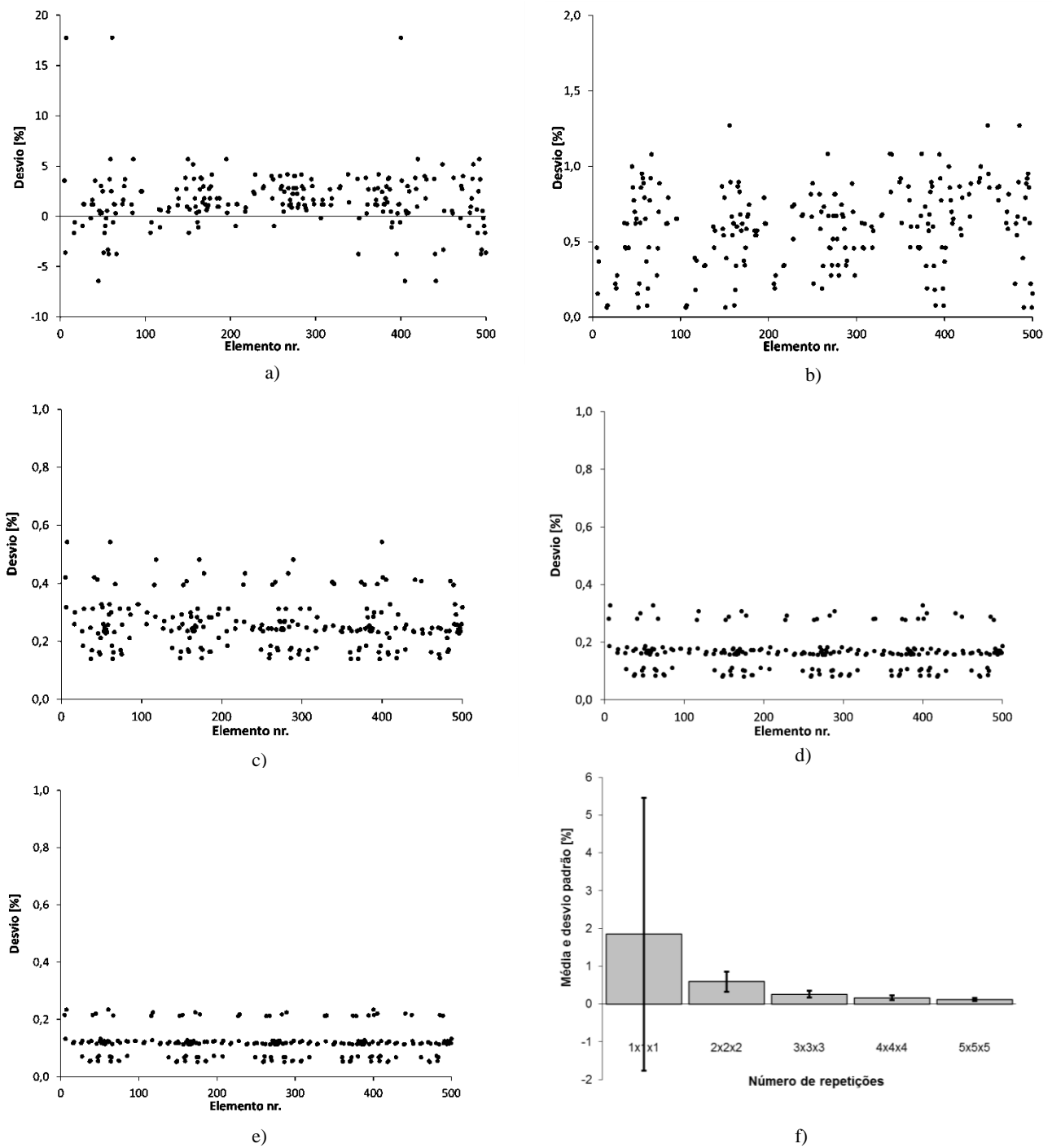


Figura 5.9: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Corte3** com constrangimento de **volume** e material celular $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$ com C.F. de Dirichlet. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) 1x1x1; b) 2x2x2; c) 3x3x3; d) 4x4x4; e) 5x5x5; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

Tabela 5.6: Resumo estatístico dos desvios representados nas figuras 5.7 a 5.9. Média \bar{e} , desvio padrão s e desvios extremos (max e min) são apresentados [%].

C.F.	Rácio	Medidas	1×1×1	2×2×2	3×3×3	4×4×4	5×5×5
Neumann	10 ¹	max	315,407	14,363	3,969	2,218	1,915
		\bar{e}	58,337	2,570	1,526	1,080	0,856
		min	-42,855	-4,163	0,291	0,013	-0,202
		s	94,794	2,397	0,748	0,592	0,589
Dirichlet	10 ¹	max	13,468	2,797	0,379	0,223	0,168
		\bar{e}	0,104	0,460	0,205	0,130	0,093
		min	-21,924	-0,093	0,085	0,049	0,028
		s	5,051	0,404	0,081	0,053	0,043
	10 ¹²	max	20,381	1,272	0,542	0,328	0,234
		\bar{e}	1,849	0,595	0,260	0,164	0,117
		min	-6,433	0,063	0,140	0,081	0,052
		s	3,609	0,266	0,084	0,060	0,047

Nas figuras 5.10 a 5.14 são apresentados os gráficos relativos ao carregamento Corte3 (com constrangimento de permeabilidade), **Corte 2** (com constrangimento de volume), **Triaxial** (com constrangimento de permeabilidade) e **Biaxial** e **Uniaxial** (com constrangimento de volume). Aqui são apenas apresentados os gráficos que contêm os resumos estatísticos em termos de média e desvio padrão. Para o caso **Corte3** e **Corte2** os gráficos relativos aos valores do desvio podem ser consultados no anexo II e III respectivamente.

No caso **Corte3** (com constrangimento de permeabilidade) verifica-se convergência nos resultados, no entanto, esta dá-se mais rapidamente no caso de material compósito com C.F. de Neumann. Aqui para $n = 5$ os valores do desvio estão compreendidos entre -0,822% e 2,224% (ver tabela 5.7). No caso de material compósito com C.F. de Dirichlet e para $n \leq 4$ detetam-se valores de desvio máximo maiores, mas o mesmo não sucede para $n = 5$ onde o valor máximo de desvio é inferior (1,203%), assim como o valor de desvio padrão. No caso do material celular os resultados do desvio são mais altos. Ainda assim, o valor do desvio padrão diminui com o aumento do fator de escala, o que mostra que existe convergência. Para este caso e $n = 5$ os valores do desvio estão compreendidos entre 1,511% e 10,037% e a média é de 2,913% o que mostra que a maior parte dos desvios estão na parte inferior do intervalo.

Para o **Corte2** (com constrangimento de volume), no caso de material compósito nota-se uma boa convergência quer quando se aplicam C.F. de Neumann ou Dirichlet. Contudo, é no segundo caso que ocorre convergência mais rapidamente e se obtêm, logo à partida, valores de desvio mais baixos (57,833% face a 467,421% para $n = 1$).

Resultados

Já para $n = 5$ os valores do desvio estão abaixo de 1,271% para o primeiro caso e 1,191% para o segundo. Relativamente ao comportamento do desvio padrão, este baixa com o aumento do fator de escala o que reforça a existência de convergência. No caso do material celular a convergência dá-se mais rapidamente que no caso de material compósito com C.F. de Neumann, mas ligeiramente mais lenta que no caso de material compósito com C.F. de Dirichlet. Aqui para $n = 5$ os valores do desvio estão compreendidos entre -0,034% e 0,402%. Já o desvio padrão decresce progressivamente, havendo um aumento não significativo de $n = 3$ para $n = 4$ (de 0,132% para 0,256%), voltando depois a decrescer (ver tabela 5.8).

No caso **Triaxial** (com constrangimento de volume) e para um material compósito obtêm-se, há semelhança dos casos anteriores, melhores resultados quando são aplicadas C.F. de Dirichlet. Para C.F. de Neumann e $n = 5$ lêem-se valores de desvio compreendidos entre -9,281% e 4,837% o que é significativo face aos resultados prévios. Apesar disso, o valor do desvio padrão decresce progressivamente. O mesmo sucede para C.F. de Dirichlet, mas para $n = 5$ os valores de desvio estão compreendidos entre -0,363% e 3,448%. Passando ao material celular os resultados são semelhantes àquilo que se verifica no caso do material compósito com C.F. de Dirichlet. A convergência do desvio padrão é regular e os valores de desvio estão compreendidos, para $n = 5$, entre -0,512% e 3,394%.

No caso **Biaxial** (com constrangimento de volume) verificam-se algumas *nuances*. Para um material compósito verifica-se aquilo que tem sido o padrão habitual, ou seja, existe uma convergência mais lenta para C.F. de Neumann, com valores de desvio compreendidos entre 12,153% e 1,014% e a média a situar-se na ordem dos 7%, para $n = 5$. Por sua vez, com C.F. Dirichlet, e para o mesmo fator de escala, os valores de desvio estão abaixo de 1,179% o que é consideravelmente melhor. Ainda para o caso de material compósito, verifica-se que o desvio padrão decresce à medida que o fator de escala aumenta até $n = 4$, aumentando para sensivelmente o dobro para $n = 5$, em ambos os casos de aplicação de condições de fronteira. No caso do material celular os resultados são bastante bons, obtendo-se valores de desvio bastante baixos para um fator de escala baixo e uma convergência regular ao nível do desvio padrão. Já para $n = 5$ os valores do desvio estão entre 0,887% e 0,888% o que resulta num valor de desvio padrão basicamente nulo (ver tabela 5.10).

O caso **Uniaxial** (com constrangimento de volume) é bastante simples e, como tal, é o que apresenta melhores resultados. No caso de material compósito com C.F. de Neumann obtêm-se valores de desvio padrão inferiores a 1% para $n \geq 4$ e os valores do desvio estão compreendidos abaixo de 1,641% para $n = 5$. Já para material compósito com C.F. de Dirichlet e para material celular obtêm-se valores de desvio padrão inferiores a 1% para $n \geq 2$. Também a partir desse fator de escala os valores dos desvios são muito baixos (ver tabela 5.11). Aqui os

valores do desvio estão entre 0,032% e 0,213% no primeiro caso e 0,219% e 0,351% no segundo.

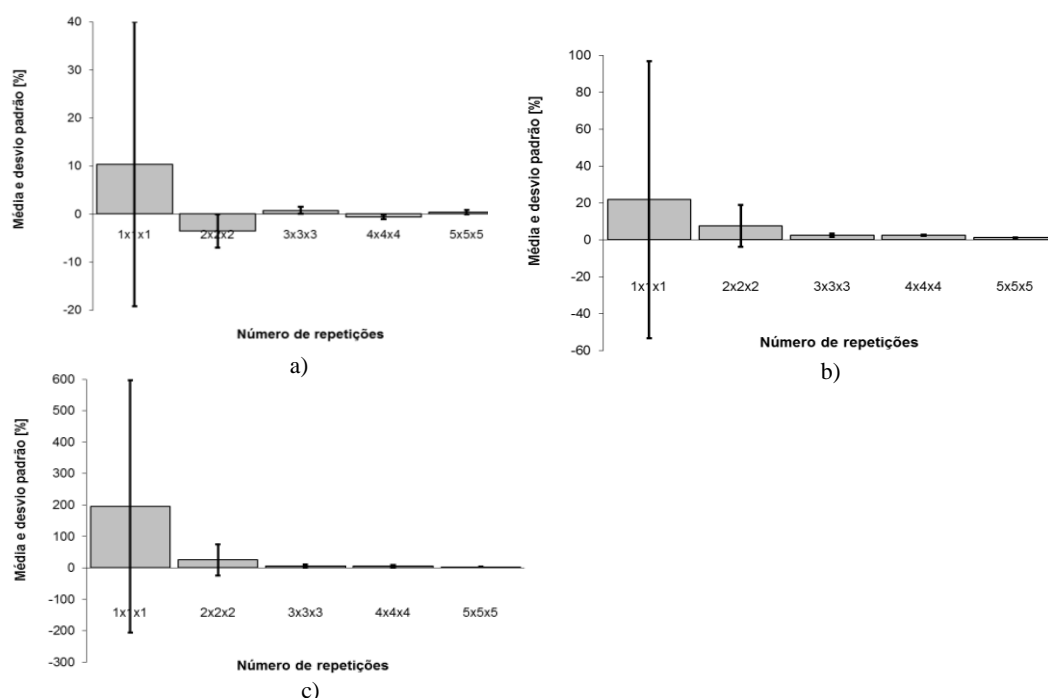


Figura 5.10: Resumo estatístico em termos de média e desvio padrão para caso de carga **Corte3** com constrangimento de **permeabilidade**. a) Material composto $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Neumann; b) material composto $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet.; c) material celular $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$ com C.F. de Dirichlet.

Tabela 5.7: Resumo estatístico dos resultados representados na figura 5.10. Média \bar{e} , desvio padrão s e desvios extremos (max e min) são apresentados [%].

C.F.	Rácio	Medidas	1x1x1	2x2x2	3x3x3	4x4x4	5x5x5
Neumann	10^1	max	72,627	16,755	2,578	1,284	2,224
		\bar{e}	10,367	-3,565	0,773	-0,645	0,382
		min	-63,156	-7,656	-4,062	-1,896	-0,822
		s	29,603	3,462	0,689	0,424	0,409
Dirichlet	10^1	max	413,691	87,220	8,493	3,525	1,203
		\bar{e}	21,743	7,435	2,397	2,422	1,111
		min	-45,606	-2,096	1,908	1,493	1,036
		s	74,992	11,343	0,844	0,360	0,039
	10^{12}	max	3424,433	408,863	13,376	27,177	10,037
		\bar{e}	195,696	25,566	5,923	5,070	2,913
		min	-21,168	-5,277	-54,236	-2,652	1,511
		s	400,885	49,306	4,834	3,698	0,876

Resultados

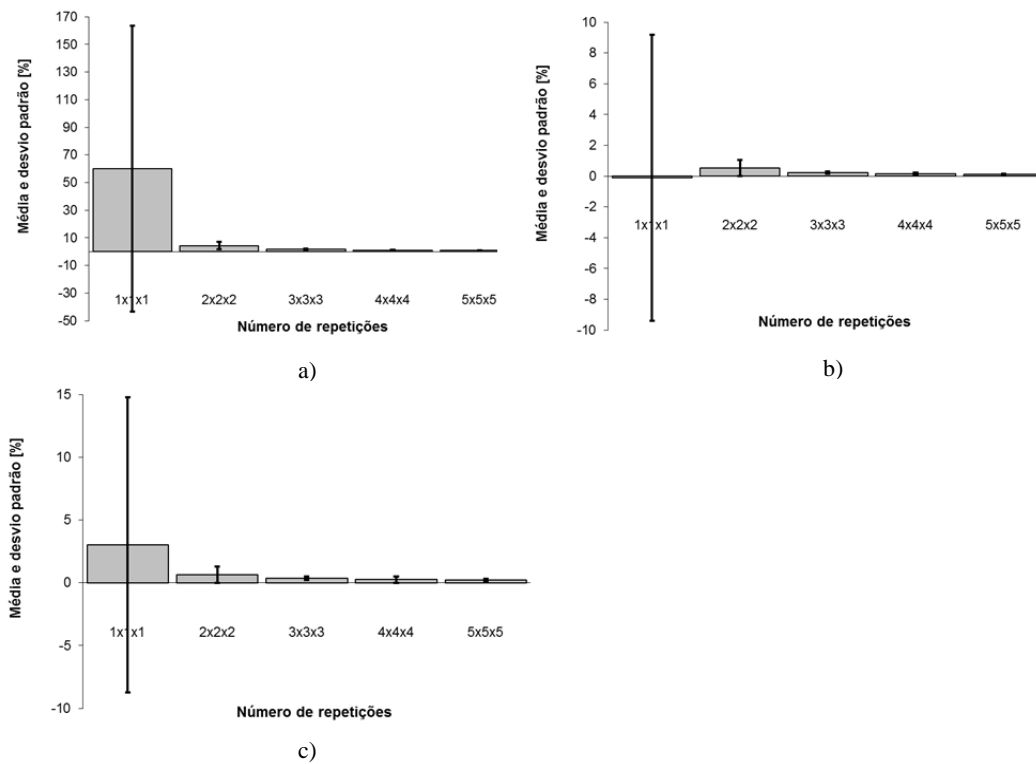


Figura 5.11: Resumo estatístico em termos de média e desvio padrão para caso de carga **Corte2** com constrangimento de **volume**. a) material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Neumann; b) material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet.; c) material celular $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$ com C.F. de Dirichlet.

Tabela 5.8: Resumo estatístico dos resultados representados na figura 5.11. Média \bar{e} , desvio padrão s e desvios extremos (max e min) são apresentados [%].

C.F.	Rácio	Medidas	1x1x1	2x2x2	3x3x3	4x4x4	5x5x5
Neumann	10^1	max	467,421	9,725	2,860	1,812	1,071
		\bar{e}	60,205	4,389	1,894	0,908	0,833
		min	-45,998	-2,443	0,121	-0,439	0,269
		s	103,446	2,563	0,493	0,395	0,143
Dirichlet	10^1	max	57,833	2,041	0,506	0,401	0,191
		\bar{e}	-0,102	0,533	0,224	0,163	0,127
		min	-23,822	-0,699	0,120	-0,033	0,091
		s	9,303	0,521	0,081	0,075	0,021
	10^{12}	max	79,917	2,373	0,798	0,656	0,402
		\bar{e}	3,015	0,630	0,376	0,247	0,214
		min	-21,381	-0,953	0,138	-0,297	-0,034
		s	11,746	0,656	0,132	0,256	0,121

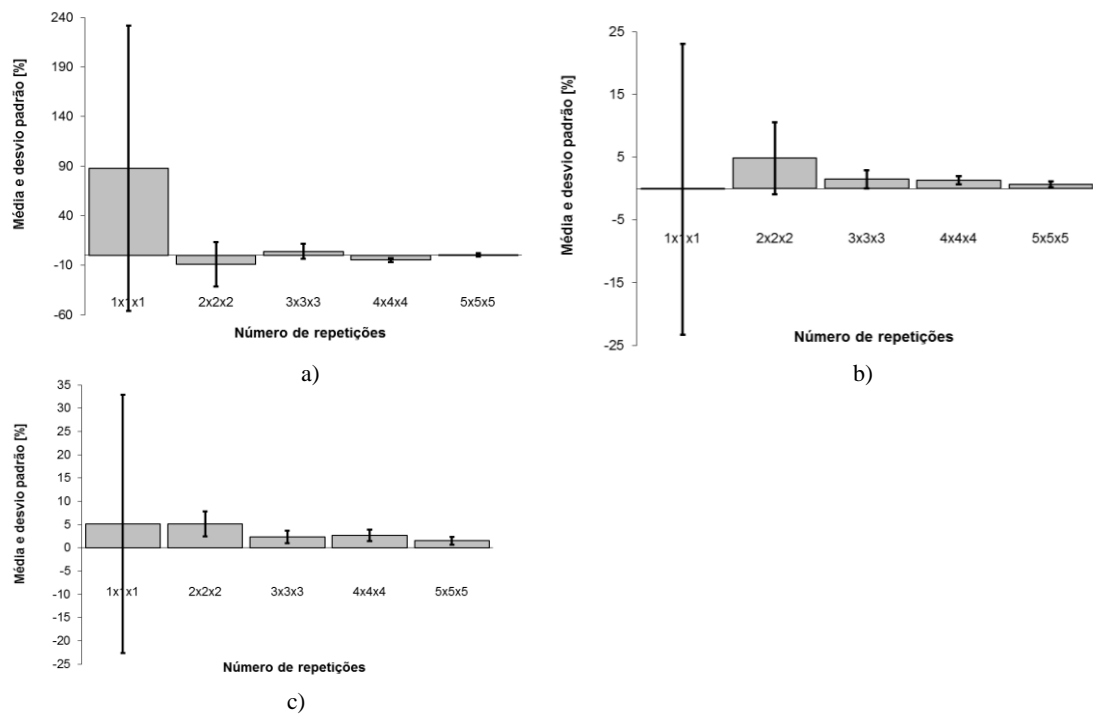


Figura 5.12: Resumo estatístico em termos de média e desvio padrão para caso de carga **Triaxial** com constrangimento de **permeabilidade**. a) material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Neumann; b) material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet.; c) material celular $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$ com C.F. de Dirichlet.

Tabela 5.9: Resumo estatístico dos resultados representados na figura 5.12. Média \bar{e} , desvio padrão s e desvios extremos (max e min) são apresentados [%].

C.F.	Rácio	Medidas	1×1×1	2×2×2	3×3×3	4×4×4	5×5×5
Neumann	10 ¹	<i>max</i>	628,485	119,378	29,012	5,404	4,837
		\bar{e}	87,982	-8,867	3,974	-4,728	0,425
		<i>min</i>	-61,007	-56,627	-36,830	-8,962	-9,281
		<i>s</i>	143,883	22,311	7,469	1,986	1,658
Dirichlet	10 ¹	<i>max</i>	87,163	44,903	11,503	5,479	3,448
		\bar{e}	-0,094	4,830	1,469	1,319	0,694
		<i>min</i>	-72,853	-6,654	-0,839	0,046	-0,363
		<i>s</i>	23,196	5,744	1,435	0,679	0,479
	10 ¹²	<i>max</i>	114,686	11,381	5,218	5,288	3,394
		\bar{e}	5,105	5,110	2,340	2,685	1,525
		<i>min</i>	-41,815	-2,648	-0,837	-0,415	-0,512
		<i>s</i>	27,795	2,653	1,317	1,255	0,850

Resultados

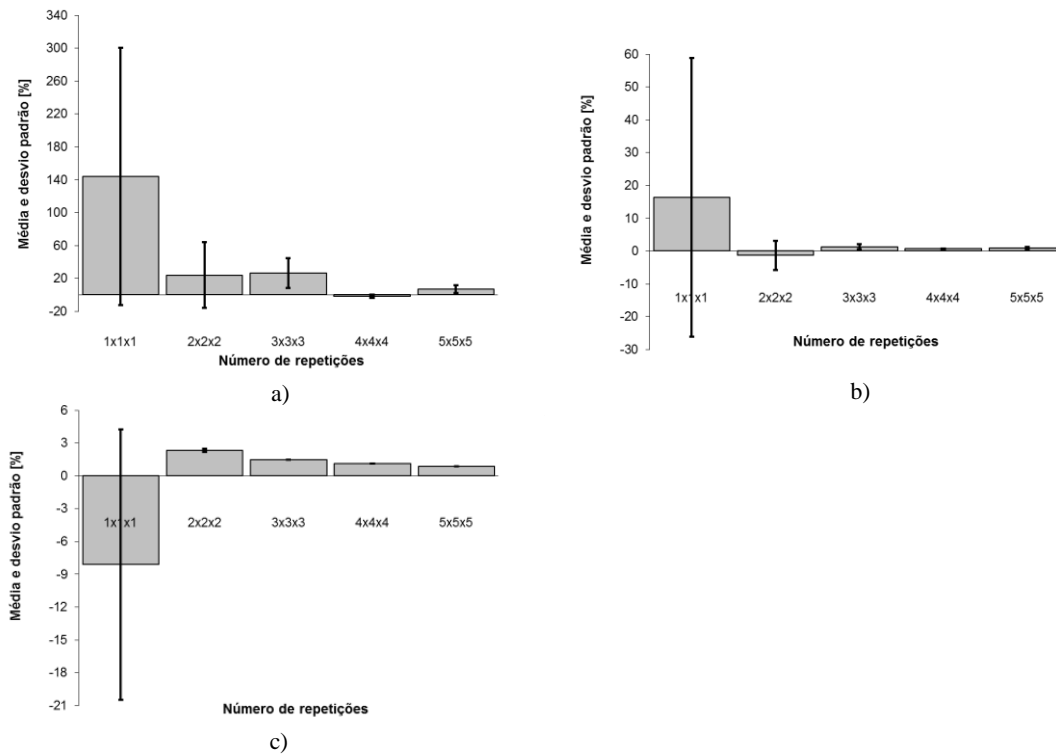


Figura 5.13: Resumo estatístico em termos de média e desvio padrão para caso de carga **Biaxial** com constrangimento de **volume** a) material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Neumann; b) material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet.; c) material celular $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$ com C.F. de Dirichlet.

Tabela 5.10: Resumo estatístico dos resultados representados na figura 5.13. Média \bar{e} , desvio padrão s e desvios extremos (max e min) são apresentados [%].

C.F.	Rácio	Medidas	1×1×1	2×2×2	3×3×3	4×4×4	5×5×5
Neumann	10^1	max	407,449	124,969	54,185	4,387	12,153
		\bar{e}	144,094	23,978	26,452	-1,604	7,102
		min	-66,270	-21,336	3,189	-4,279	1,014
		s	156,574	40,063	18,415	2,010	4,771
Dirichlet	10^1	max	114,712	3,320	2,541	0,849	1,170
		\bar{e}	16,376	-1,323	1,330	0,675	0,918
		min	-37,310	-12,452	-0,548	0,246	0,600
		s	42,557	4,431	0,683	0,140	0,259
	10^{12}	max	2,949	2,922	1,494	1,113	0,888
		\bar{e}	-8,112	2,327	1,485	1,111	0,887
		min	-40,726	2,208	1,480	1,110	0,887
		s	12,380	0,141	0,003	0,001	0,000

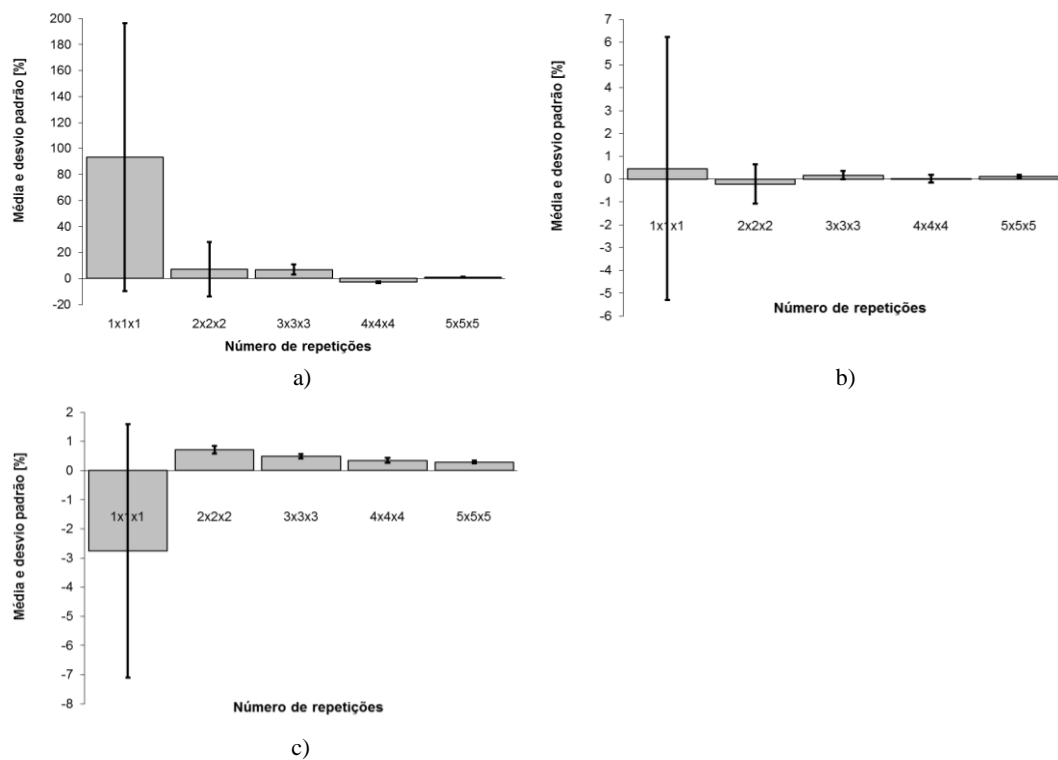


Figura 5.14: Resumo estatístico em termos de média e desvio padrão para caso de carga **Uniaxial** com constrangimento de **volume**. a) material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Neumann; b) material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet.; c) material celular $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$ com C.F. de Dirichlet.

Tabela 5.11: Resumo estatístico dos resultados representados na figura 5.14. Média \bar{e} , desvio padrão s e desvios extremos (max e min) são apresentados [%].

C.F.	Rácio	Medidas	1×1×1	2×2×2	3×3×3	4×4×4	5×5×5
Neumann	10 ¹	max	282,180	82,801	19,962	-0,892	1,641
		\bar{e}	93,443	7,209	6,864	-2,900	0,977
		min	-61,095	-14,898	2,143	-3,363	0,471
		s	103,138	21,018	3,933	0,459	0,339
Dirichlet	10 ¹	max	18,031	1,120	0,383	0,257	0,213
		\bar{e}	0,465	-0,220	0,167	0,019	0,105
		min	-12,327	-2,698	-0,335	-0,187	0,032
		s	5,762	0,861	0,180	0,164	0,071
	10 ¹²	max	1,191	1,177	0,574	0,442	0,351
		\bar{e}	-2,754	0,719	0,493	0,348	0,295
		min	-13,893	0,413	0,370	0,222	0,219
		s	4,355	0,129	0,069	0,084	0,050

5.2.2 Análise da periodicidade

Nesta secção é feito o estudo dos efeitos de escala para a periodicidade na tensão (ver secção 3.4). As microestruturas consideradas são as seguintes: **Hidroestático** e **Corte3** (com constrangimento de volume).

Neste estudo será apenas considerado o caso de material compósito com C.F. de Dirichlet pois verificou-se que os casos de material compósito com C.F. de Neumann e material celular com C.F. de Dirichlet apresentavam o mesmo padrão de distribuição de tensão, havendo apenas uma diferença nos valores das tensões lidos em cada elemento. Como foi explicado no capítulo 4, os resultados são obtidos através do ANSYS e é possível ler os componentes individuais do tensor das tensões assim como a tensão equivalente de von-Mises em cada elemento. À semelhança da análise de convergência da tensão na célula central será avaliado o valor da tensão equivalente no elemento, por uma questão de simplicidade.

Aqui, para cada caso, serão escolhidas colunas de elementos que distam um período Y entre si. Na figura 5.15 pode-se ver as posições onde as colunas de elementos são seleccionadas, para cada repetição da célula de base unitária. Estas pertencem a um plano xy do compósito que se situa a meio do eixo z e estão localizadas, para repetições pares, a meio da célula de base unitária e encostadas o mais à direita da mesma, para repetições ímpares.

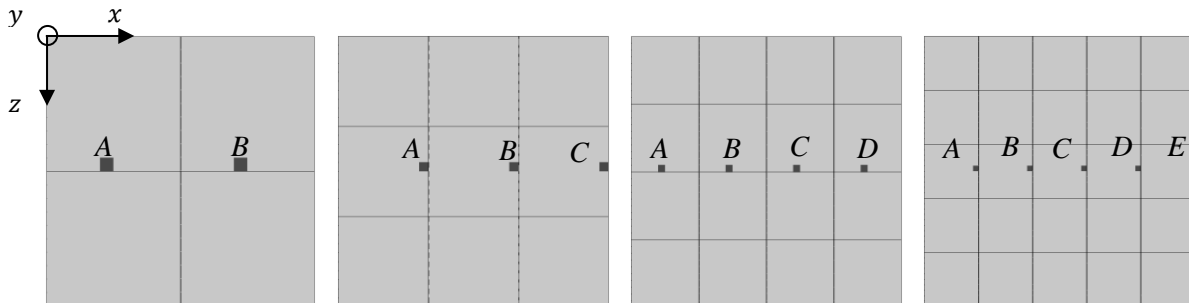


Figura 5.15: Posição das colunas de elementos a serem avaliadas no estudo da periodicidade da tensão e para um número crescente de repetições da célula de base unitária. Representação em 2D para maior simplicidade.

Na figura 5.16 pode-se ver a topologia que as duas microestruturas em estudo assumem no respetivo plano, assim como as colunas de elementos que serão comparadas, tanto para repetições pares como para ímpares.

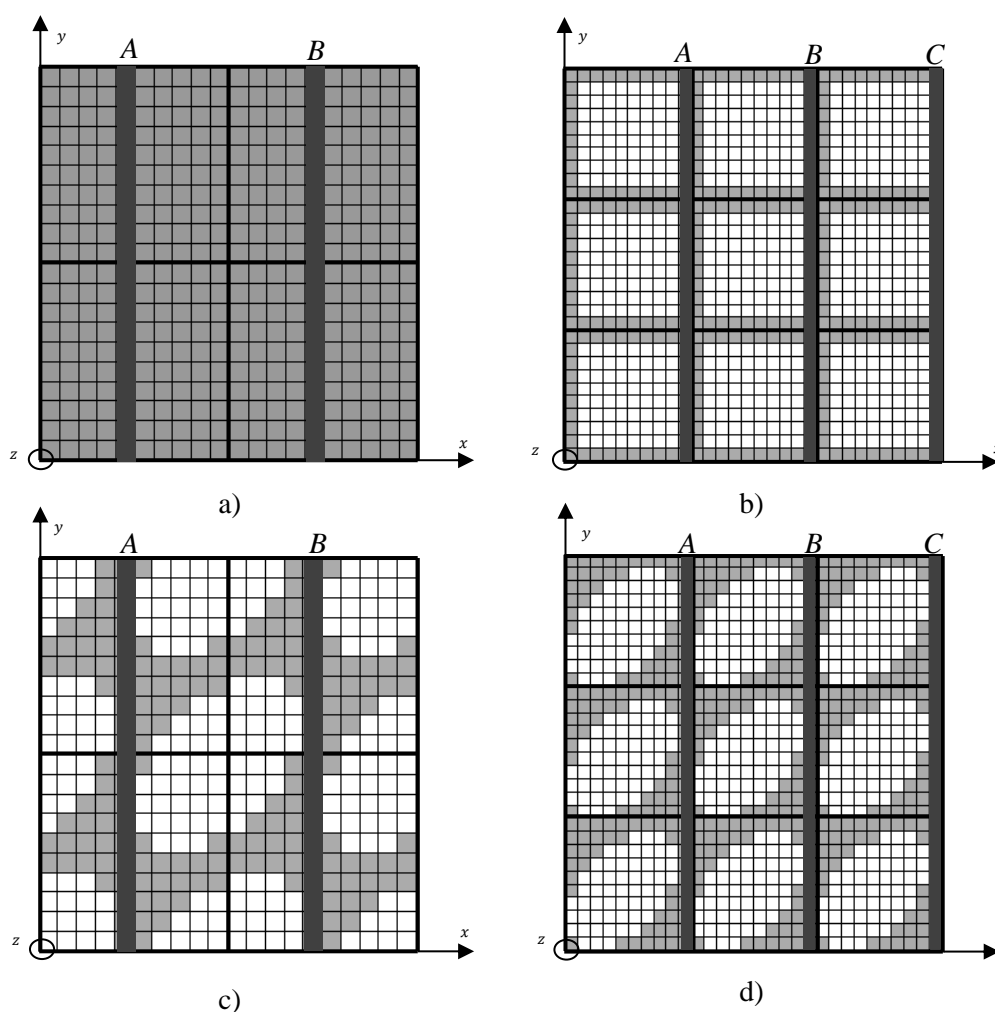


Figura 5.16: Topologia obtida e posição das colunas de elementos no plano xy em estudo, para cada microestrutura e tanto para repetições pares como ímpares; a) hidrostático $2 \times 2 \times 2$; b) hidrostático $3 \times 3 \times 3$; c) corte3 $2 \times 2 \times 2$; d) corte3 $3 \times 3 \times 3$.

Como se pode ver em ambos os casos, a topologia da microestrutura no plano em questão não é igual. Por essa razão, no caso **Hidrostático** e para repetições ímpares foi utilizado uma topologia descentrada. Desta forma foi possível obter-se topologias equivalentes. Ainda assim, para garantir que se estão a comparar elementos em posições relativas da microestrutura semelhantes, para repetições ímpares a posição das colunas deve ser a indicada. Outra alternativa passava por, para um fator de escala n ímpar, seleccionar-se um plano diferente do compósito e manter a posição das colunas utilizada para um fator par. No entanto, considerou-se que esta hipótese seria pior pois, deste modo, estar-se-ia a alterar a distância das colunas às extremidades do compósito. Já no caso **Corte3** há a particularidade da topologia original e descentrada serem iguais (devido a haver simetria segundo a direcção octaedral da microestrutura) pelo que a solução passa igualmente por ajustar a posição onde os elementos serão avaliados.

Resultados

A figura 5.17 mostra o que foi explicado no parágrafo anterior. Na mesma pode-se ver a microestrutura do compósito para o caso **Hidrostático** e para o caso de topologia descentrada (figura 5.17a), cortada a meio do eixo z. Para caso par é mostrado novo plano de corte, para melhor interpretação do *design* da célula unitária.

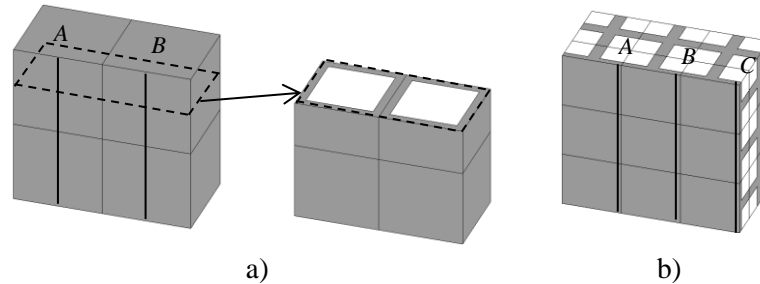


Figura 5.17: Localização das colunas de elementos no plano xy médio do compósito para caso **Hidrostático** e fator de escala par e ímpar. a) $2 \times 2 \times 2$; b) $3 \times 3 \times 3$ com topologia descentrada.

De seguida, nas figuras 5.18 e 5.20, serão apresentados os resultados obtidos no estudo da periodicidade através de uma representação gráfica que mostra a flutuação da tensão ao longo do eixo y , em cada coluna de elementos, para um número crescente de repetições da célula de base unitária e as topologias consideradas. Nesta pode-se ler no eixo das abcissas o valor da tensão equivalente e no eixo das ordenadas os elementos ao longo do eixo y . Esta representação gráfica será ainda precedida de uma representação extraída da *interface* gráfica do ANSYS (figura 5.19 e 5.21) que mostra a distribuição da tensão equivalente nos planos xy exibidos na figura 5.16 e 5.17 (no caso **hidroestático** utilizou-se uma topologia descentrada para fatores de escala ímpares). Estas têm particular interesse pois permitiram averiguar qual as zonas mais interessantes para se fazer a recolha dos resultados, isto é, a zona do plano onde a tensão é mais alta (crítica).

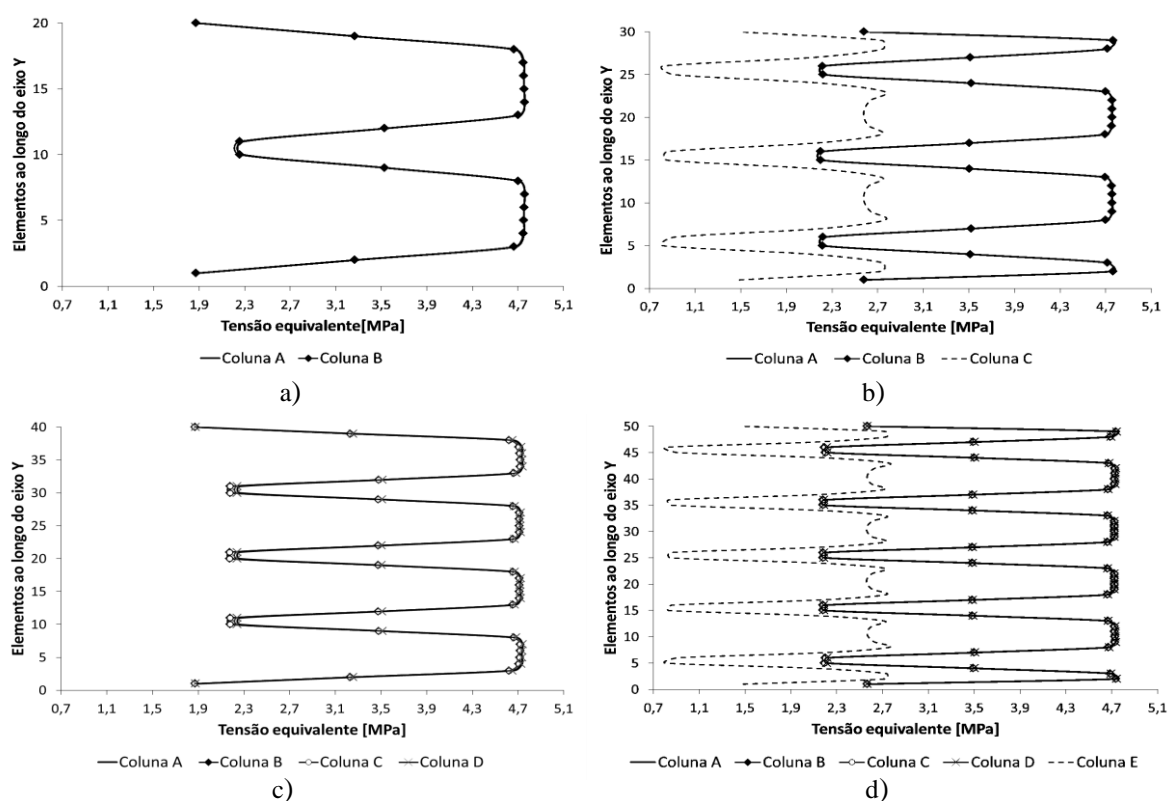


Figura 5.18: Análise da periodicidade para caso de carga **Hidrostático** com constrangimento de **volume** e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet. Tensão avaliada em cada elemento, das colunas selecionadas, ao longo do eixo **y** para um fator de escala crescente: a) 2x2x2; b) 3x3x3; c) 4x4x4; d) 5x5x5.

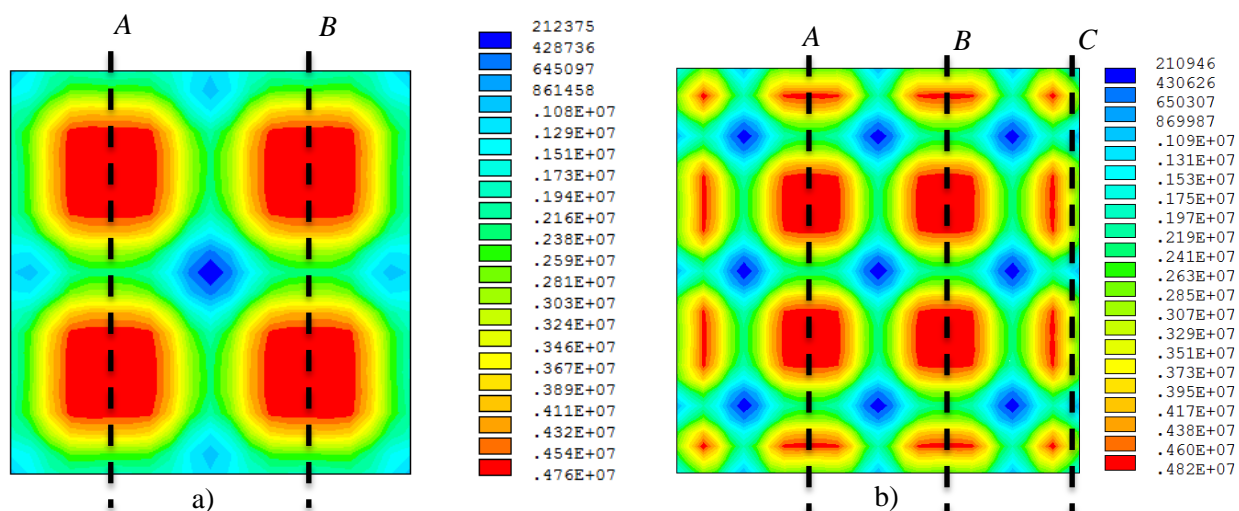


Figura 5.19: Distribuição da tensão equivalente (MPa) para caso de carga **Hidrostático** com constrangimento de **volume** e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet. a) 2x2x2; b) 3x3x3.

Resultados

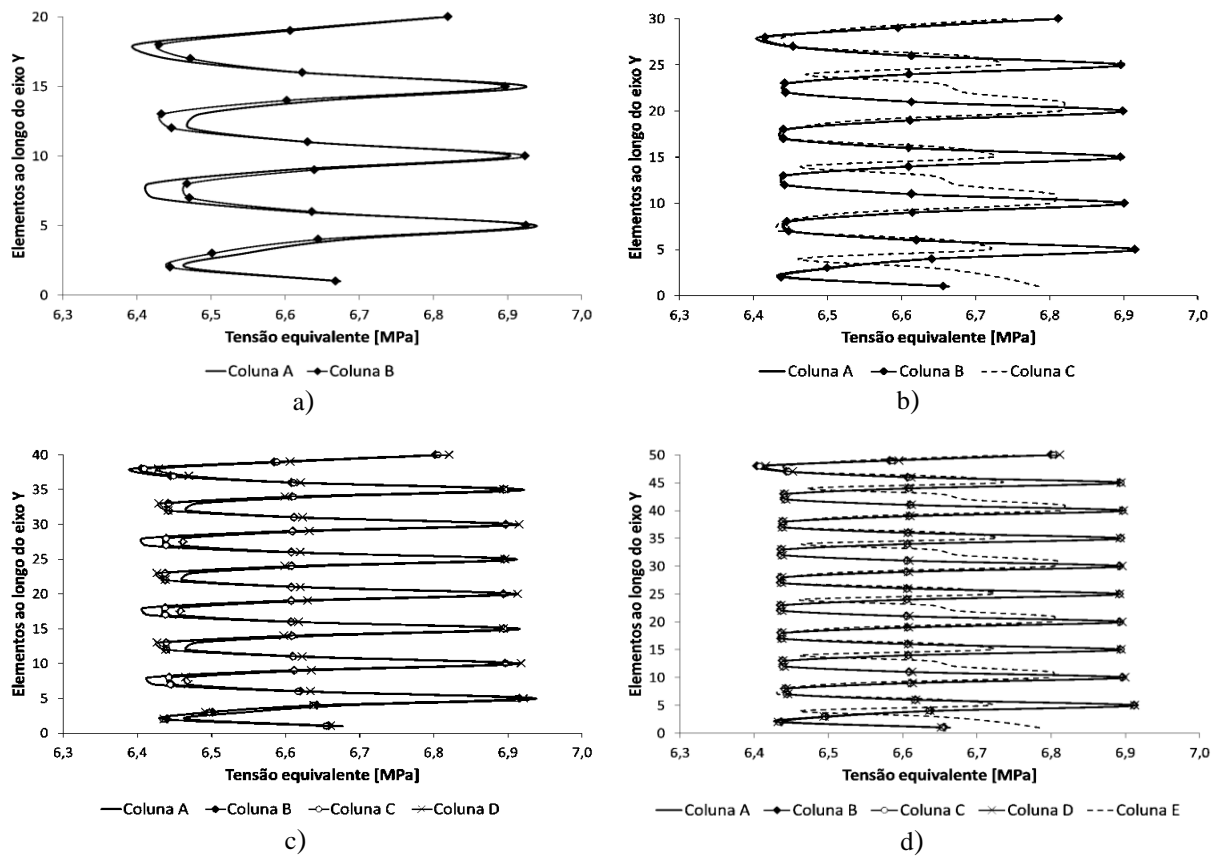


Figura 5.20: Análise da periodicidade para caso de carga **Corte3** com constrangimento de **volume** e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet. Tensão avaliada em cada elemento, das colunas selecionadas, ao longo do eixo **y** para um fator de escala crescente: a) 2x2x2; b) 3x3x3; c) 4x4x4; d) 5x5x5.

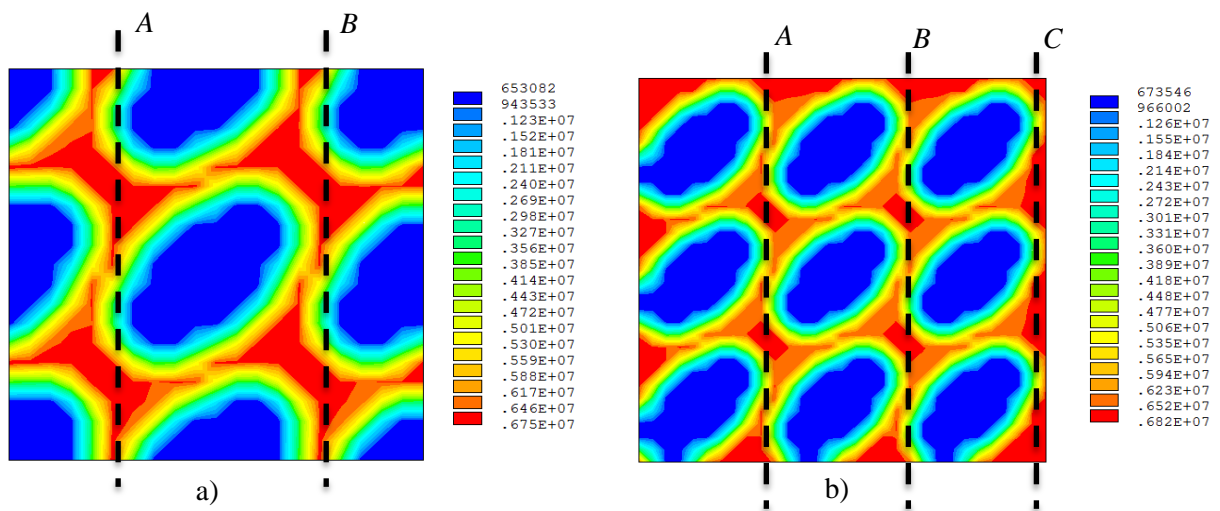


Figura 5.21: Distribuição da tensão equivalente (MPa) para caso de carga **Corte3** com constrangimento de **volume** e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet. a) 2x2x2; b) 3x3x3.

Na figura 5.17 está representado o caso hidrostático com constrangimento de volume e material compósito com C.F. de Dirichlet. Os resultados mostram que se obtém um padrão periódico perfeitamente estabelecido logo para o fator de escala inicial, $n = 2$. Para $n = 3$ e $n = 5$ a coluna mais à direita do plano (coluna C para $n = 3$ e coluna E para $n = 5$) surge desviada relativamente às restantes. Tal acontece pois esta coluna situa-se mais perto da extremidade do compósito que as restantes, ao passo que em repetições pares todas as colunas estão à mesma distância das extremidades. Optou-se por, nestes casos, representar a flutuação da tensão nessas colunas a traço interrompido, de modo a realçar que os valores da tensão lidos nos elementos das restantes colunas coincidem. Consegue-se ainda perceber que os valores mais altos da tensão surgem no material mais forte.

Na figura 5.19 está representado o caso corte3 com constrangimento de volume e material compósito com C.F. de Dirichlet. Tal como no caso anterior, percebe-se existir periodicidade na tensão logo para um fator de escala baixo $n = 2$, o que é considerável e mostra que os resultados são bastante bons. Comparativamente ao caso anterior, e por se tratar duma microestrutura com uma topologia um pouco mais complexa, nota-se que em alguns elementos há uma discrepância no valor da tensão obtido, mas pouco significativa.

6 Conclusões e desenvolvimentos futuros

Esta dissertação contribui para a investigação da análise de efeitos de escala com critérios de tensão, em materiais compósitos de microestrutura periódica com diferentes graus de anisotropia. A aplicação destes materiais tem recebido bastante atenção, principalmente no projeto de *scaffolds* (suportes biomiméticos), pois permitem obter bons compromissos entre propriedades mecânicas conflitantes e que noutros materiais não seria possível.

Com o objetivo de se tratar um meio heterogéneo como um meio homogéneo com propriedades mecânicas equivalentes é utilizada a teoria da homogeneização para estimar as propriedades elásticas de materiais compósitos periódicos. Esta assume condições de fronteira periódicas e periodicidade infinita do meio (resolve um problema adimensional), o que não se verifica na prática. Logo, fez-se uma comparação entre os valores da tensão equivalente de von-Mises calculados pela teoria da homogeneização, através do POSTMAT, e por ensaios mecânicos normalizados através do ANSYS. Por outro lado, fez-se a análise dos efeitos de escala para averiguar se existe um padrão periódico na distribuição da tensão, quando se aplicam ensaios mecânicos normalizados a um compósito de microestrutura periódica.

Primeiro foi gerado um conjunto de topologias através da resolução de um problema de otimização topológica, formulado como a minimização da *compliance* sujeito a constrangimentos de volume ou permeabilidade, e para diferentes estados de tensão e de anisotropia. De seguida fez-se uma seleção que constituísse um bom conjunto representativo, a ser utilizado para a análise de efeitos de escala.

Conclusões e desenvolvimentos futuros

Como a teoria da homogeneização assume periodicidade infinita do meio, apenas analisa uma única célula, já que assim garante o mesmo resultado para qualquer número de células. No entanto, na prática um material compósito não é adimensional e é gerado através da repetição da célula de base unitária n vezes em cada direção espacial ($n \times n \times n$). Neste trabalho, para cada fator de escala n , o compósito pode ser submetido até quinze testes numéricos, aplicando condições de fronteira de tensão ou de deslocamento, e n varia de 1 a 5. O objeto de estudo é o valor da tensão nos elementos do compósito e o objetivo é a verificação da convergência dos valores obtidos pelos ensaios numéricos para os valores obtidos pela homogeneização e a obtenção de um padrão periódico na distribuição da tensão no compósito, para um fator de escala n crescente.

Aqui foram utilizados dois modelos de material: material compósito (duas fases sólidas) e material poroso ou celular (fase sólida/vazio). Um dos desafios desta dissertação foi o de lidar com as C.F. de Neumann, uma vez que a aplicação de uma tensão diretamente em elementos da fase de vazio leva a uma excessiva deformação dos mesmos. Assim, a utilização destas C.F. teve de se restringir ao caso de material compósito. Já para C.F. de Dirichlet não existe este problema, pelo que foi possível a utilização das mesmas para os dois modelos de material, compósito e celular.

Este trabalho mostra que na prática, inclusive para um fator de escala n baixo ($n = 5$), é admissível utilizar os valores obtidos pela teoria da homogeneização, para além de que existe um padrão periódico na distribuição da tensão no compósito.

Neste trabalho são utilizados critérios de tensão para a análise dos efeitos de escala, no entanto existe interesse em se fazer um estudo semelhante com outros critérios, como coeficiente de Poisson, permeabilidade, entre outros. Em Amiano (2015) é feito um estudo de efeitos de escala com foco nas propriedades elásticas onde ficou provado que os coeficientes dos tensores elásticos homogeneizados fora da diagonal apresentavam uma pior convergência. Também nesse trabalho ficou provado que é admissível utilizar os resultados obtidos pela homogeneização, para um fator de escala baixo. Por outro lado, devido a limitações de *software*, foi apenas possível a utilização de uma malha $10 \times 10 \times 10$ que é relativamente grosseira, pelo que existe também o interesse de se averiguar a influência da malha utilizada nos resultados obtidos, à semelhança do se faz para o fator de escala.

Relativamente à análise da convergência de tensão, a comparação dos resultados do POSTMAT é feito com os do ANSYS obtidos na célula central do compósito. No entanto, os compósitos analisados possuem um número finito de células unitárias (e como tal têm dimensões finitas), ao contrário do que sucede na homogeneização que assume um número infinito das mesmas. Por este motivo, utilizar apenas a célula central como objeto de comparação pode ser simplista. Uma alternativa de interesse seria a de avaliar a influência da

localização da célula de base unitária do compósito na comparação com os resultados da homogeneização. Por exemplo perceber qual a diferença nos resultados quando se comparam os valores da célula de base unitária e uma outra célula mais próxima da periferia do compósito.

Nesta dissertação, o contributo ao nível de otimização com critérios de tensão reside numa revisão literária, no entanto este é um campo de interesse. De fato, a tensão é um critério muito apelativo em engenharia, pois um *design* ótimo deve ser igualmente viável quando implementado na prática. Em contrapartida, a introdução de critérios de tensão em otimização topológica apresenta vários desafios: (1) problema da singularidade; (2) natureza local do constrangimento de tensão; (3) comportamento altamente não linear da tensão. Existem já várias contribuições que permitem lidar com esses desafios e já se obtêm bons resultados para estruturas a nível macroscópico, no entanto, ao nível da microestrutura de material, ainda há muito a explorar. Dessa forma, a análise de tensões em materiais de microestrutura periódica que foi desenvolvida neste trabalho, representa algum trabalho de preliminar para o *design* topológico ótimo de células de base unitárias com constrangimentos de tensão.

Referências bibliográficas

Referências bibliográficas

- A**amiano, D. A. (2015). Análise e otimização de materiais compósitos de microestrutura periódica. Tese de Mestrado, Faculdade de Ciências e Tecnologias da Universidade Nova de Lisboa.
- Amstutz, S., & Novotny, A. A. (2010). Topological optimization of structures subject to Von Mises stress constraints. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 41(3), 407–420.
- Ashby, M. F., Bréchet, Y. J. M., Cebon, D., & Salvo, L. (2004). Selection strategies for materials and processes. *Materials & Design*, 25(1), 51–67.
- B**endsøe, M. P. (1989). Optimal shape design as a material distribution problem. *Structural Optimization*, 202, 193–202.
- Bendsøe, M. P., & Kikuchi, N. (1988). Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 71, 197–224.
- Bendsøe, M. P., & Sigmund, O. (2003). *Topology optimization: theory, methods and applications*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Bruggi, M. (2008). On an alternative approach to stress constraints relaxation in topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 36(2), 125–141.
- C**ardoso, J. B., & Coelho, P. G. (2012). Métodos computacionais em engenharia mecânica. Apontamentos da disciplina de Métodos Computacionais em Engenharia Mecânica, Faculdade de Ciências e Tecnologias da Universidade Nova de Lisboa.
- Cheng, G. D & Guo, Xu. (1997). e-relaxed approach in structural topology optimization. *Structural Optimization*, 13(1972), 258–266.
- Coelho, P. G. (2009). Modelos hierárquicos para a análise e síntese de estruturas e materiais com aplicações à remodelação óssea. Tese de Doutoramento, Faculdade de Ciências e Tecnologias da Universidade Nova de Lisboa.
- Coelho, P. G., Amiano, L.D., Guedes, J.M., & Rodrigues, H.C. (2015). Scale-size effects analysis of optimal periodic material microstructures designed by the inverse homogenization method. *Computers and Structures*. (In press).
- Coelho, P. G., Hollister, S. J., Flanagan, C. L., & Fernandes, P. R. (2015). Bioresorbable scaffolds for bone tissue engineering: optimal design, fabrication, mechanical testing and scale-size effects analysis. *Medical Engineering & Physics*, 37(3), 287–96.
- Coelho, P. G., Reis, R. A., & Guedes, J.M. (2016). Convergence analysis of stress fields to homogenization predictions in optimal periodic composite design. *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering-ECCOMAS Congress*. 5-10 Junho, Crete Island, Greece. (Accepted).

Dias, M. R., Guedes, J. M., Flanagan, C. L., Hollister, S. J., & Fernandes, P. R. (2014). Optimization of scaffold design for bone tissue engineering: A computational and experimental study. *Medical Engineering and Physics*, 36(4), 448–457.

Duysinx, P. (1998). Topology of continuum structures with local stress constraints. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1478(June 1997), 1453–1478.

Emmendoerfer, H., & Fancello, E. A. (2014). A level set approach for topology optimization with local stress constraints. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 99, 129–156.

Eshraghi, S., & Das, S. (2010). Mechanical and microstructural properties of polycaprolactone scaffolds oriented porous architectures produced by selective laser sintering. *Acta Biomaterialia*, 6(7), 2467–2476.

Eshraghi, S., & Das, S. (2012). Micromechanical finite-element modeling and experimental characterization of the compressive mechanical properties of polycaprolactone – hydroxyapatite composite scaffolds prepared by selective laser sintering for bone tissue engineering. *Acta Biomaterialia*, 8(8), 3138–3143.

Ferreira, R. T. L., Rodrigues, H. C., & Guedes, M. (2013). Hierarchical optimization of laminated fiber reinforced composites. In *10th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization*, Orlando, Florida, USA (pp. 1–6).

Guedes, J.M., & Kikuchi, N. (1990). Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 83, 143–198.

Guo, X., Zhang, W., & Zhong, W. (2014). Stress-related topology optimization of continuum structures involving multi-phase materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 268, 632–655.

Holmberg, E. (2013). Stress and fatigue constrained topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*. Licentiate Thesis No. 1571, Department of Management and Engineering, Division of Mechanics Linköping University, SE-581 83, Linköping, Sweden.

Holmberg, E., Torstenfelt, B., & Klarbring, A. (2014). Stress constrained topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 50, 207–219.

Jones, R. M. (1999). *Mechanics Of Composite Materials*. Taylor & Francis.

Kang, H., Lin, C. Y., & Hollister, S. J. (2010). Topology optimization of three dimensional tissue engineering scaffold architectures for prescribed bulk modulus and diffusivity. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 42(4), 633–644.

Kirsch, U. (1990). On singular topologies in optimum structural design. *Structural Optimization*, 2, 133–142.

Lee, C., Norato, J., Bruns, T., Ha, C., & Tortorelli, D. (2010). Stress-based topology optimization for continua. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 41(4), 605–620.

Lee, E. (2012). Stress-constrained structural topology optimization with design-dependent loads. Master's thesis, Department of Institute for Aerospace Studies University of Toronto.

Lee, E., James, K.A., & Martins, J. R.R.A. (2012). Stress-constrained topology optimization with design-dependent loading. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 46(5), 647–661.

Lin, J.-Y. (2005). Stress Relaxation of Cellular Materials. *Journal of Composite Materials*, 39(3), 233–245.

Lipton, R., & Stuebner, M. (2006). Optimization of composite structures subject to local stress constraints. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196, 66–75.

Luo, Y., & Kang, Z. (2012). Topology optimization of continuum structures with e-relaxed stress constraints. *Computers and Structures*, 90-91(June 1997), 65–75.

Mase, G. T., & Mase, G. E. (1999). *Continuum mechanics for engineers*. CRC Press LLC.

Min, Y., Zhi, X., Zuo, H., & Huang, X. (2012). Convergence of topological patterns of optimal periodic structures under multiple scales. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 46, 41–50.

Navarrina, F., Muiños, I., Colominas, I., & Casteleiro, M. (2005). Topology optimization of structures: A minimum weight approach with stress constraints. *Advances in Engineering Software*, 36 (9), 599-606.

Nezerka, V. (2012). *Materials Containing Coated and Uncoated Spherical Inhomogeneities*. Czech Technical University, Faculty of Civil Engineering, Department of Mechanics.

Olason, A. (2010). *Methodology for Topology and Shape Optimization in the Design Process*. Master's Thesis, Department of applied mechanics, Division of dynamics, Chalmers University of Technology.

París, J., Colominas, I., Navarrina, F., & Casteleiro, M. (2013). Parallel computing in topology optimization of structures with stress constraints. *Computers and Structures*, 125, 62–73.

París, J., Navarrina, F., Colominas, I., & Casteleiro, M. (2009). Topology optimization of continuum structures with local and global stress constraints. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 39(4), 419–437.

Referências bibliográficas

- París, J., Navarrina, F., Colominas, I., & Casteleiro, M. (2010a). Block aggregation of stress constraints in topology optimization of structures. *Advances in Engineering Software*, 41(3), 433–441.
- París, J., Navarrina, F., Colominas, I., & Casteleiro, M. (2010b). Improvements in the treatment of stress constraints in structural topology optimization problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 234(7), 2231–2238.
- París, J., Navarrina, F., Colominas, I., & Casteleiro, M. (2010c). Stress constraints sensitivity analysis in structural topology optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(33-36), 2110–2122.
- Pecullan, S., Gibiansky, L. V., & Torquato, S. (1998). Scale effects on the elastic behavior of periodic and hierarchical two-dimensional composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47, 1509–1542.
- Pereira, J. T, Fancello, E. A, Barcellos, C. S (2004). Topology optimization of continuum structures with material failure constraints. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 26, 50-66.
- S**igmund, O. (1994). Materials with prescribed constitutive parameters: An inverse homogenization problem. *International Journal of Solids and Structures*, 31(17), 2313–2329.
- Sigmund, O. (2001). A 99 line topology optimization code written in Matlab. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, (1999), 120–127.
- Svanberg, K. (1987). The method of moving asymptotes - a new method for structural optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24, 359–373.
- V**erbart, A. (2015). Topology optimization with stress constraints. Ter verkrijging van de graad van doctor aan de Technische Universiteit Delft.
- Verbart, A., Langelaar, M., & van Keulen, F. (2013). A new approach for stress-based topology optimization: Internal stress penalization. In *10th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization*, Orlando, Florida, USA.
- W**ieding, J., Souffrant, R., Mittelmeier, W., & Bader, R. (2013). Finite element analysis on the biomechanical stability of open porous titanium scaffolds for large segmental bone defects under physiological load conditions. *Medical Engineering & Physics*, 35(4), 422–32.
- Wieding, J., Wolf, A., & Bader, R. (2014). Numerical optimization of open-porous bone scaffold structures to match the elastic properties of human cortical bone. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 37, 56–68.
- Williams, J. M., Adewunmi, A., Schek, R. M., Flanagan, C. L., Krebsbach, P. H., Feinberg, S. E., ... Das, S. (2005). Bone tissue engineering using polycaprolactone scaffolds fabricated via selective laser sintering. *Biomaterials*, 26, 4817–4827.

Wu, S., Liu, X., Yeung, K. W. K., Liu, C., & Yang, X. (2014). Biomimetic porous scaffolds for bone tissue engineering. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 80, 1–36.

Yalamanchili, V. (2012). Topology optimization of structures using global stress measure. Master's Thesis, Graduate School of the University of Florida.

Yang, R. J., & Chen, C. J. (1996). Stress-based topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 12(2), 98–105.

Zhang, W. H., & Sun, S. P. (2006). Scale-related topology optimization of cellular materials and structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 68(9), 993–1011.

Zohdi, T., & Wriggers, P. (2015). *An Introduction to Computational Micromechanics*. Springer.

Anexos

Anexo I

Tabela A.1: Tabela com resultados de módulo de Young obtidos por ensaios mecânicos, para várias amostras de PCL.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1						Preload measure					
2		Caliper Measures									
3	SpecimenID	Specimen_pretest_Height	Thickness	Width	Area	Specimen Height	Slope	Modulus	Strain At Yield	YieldStress	Load_at_yield
4		mm	mm	mm	mm^2	mm	N/mm	MPa	mm/mm	MPa	N
5	x_1	16.42	8.37	8.09	67.67	16.25	1228.28	294.91	0.044	10.87	735.67
6	x_2	16.48	8.39	8.09	67.88	16.29	1214.23	291.48	0.045	10.97	744.35
7	x_3	16.43	8.34	8.09	67.43	16.28	1228.08	296.47	0.045	11.03	743.78
8	x_4	16.44	8.33	8.10	67.43	16.30	1225.70	296.19	0.045	10.91	735.65
9	x_5	16.49	8.37	8.09	67.67	16.32	1206.14	290.93	0.045	10.86	734.83
10	x_6	16.42	8.35	8.07	67.34	16.28	1254.13	303.15	0.044	10.92	735.25
11	average	16.45	8.35	8.09	67.57	16.29	1226.09	295.52	0.04	10.93	738.25
12	std	0.03	0.02	0.01	0.20	0.02	16.33	4.41	0.00	0.06	4.51
13											
14	Y_1	16.56	8.345	8.085	67.469	16.244	1229.7	296.058	0.047	11.221	757.044
15	Y_2	16.48	8.3	8.085	67.106	16.123	1262.5	303.33	0.043	11.133	747.083
16	Y_3	16.56	8.335	8.085	67.388	16.258	1184.63	285.797	0.049	11.204	755.043
17	Y_4	16.56	8.365	8.08	67.589	16.202	1248.07	299.18	0.046	11.266	761.481
18	Y_5	16.53	8.345	8.07	67.344	16.213	1255.1	302.156	0.047	11.193	753.763
19	Y_6_2	16.535	8.36	8.08	67.549	15.852	1214.81	285.083			
20	Y_7	16.575	8.325	8.08	67.266	16.222	1151.07	277.592	0.047	10.769	724.374
21	average	16.54	8.34	8.08	67.39	16.16	1220.84	292.74	0.05	11.13	749.80
22	std	0.03	0.02	0.01	0.17	0.14	40.71	9.91	0.00	0.18	13.31
23											
24	Z_1	15.79	8.36	8.36	69.89	15.493	1411.19	312.833	0.046	11.327	791.641
25	Z_2	15.82	8.39	8.33	69.889	15.522	1401.11	311.178	0.045	11.154	779.558
26	Z_3	15.79	8.38	8.285	69.428	15.502	1405.08	313.725	0.045	11.204	777.882
27	Z_4	15.83	8.48	8.345	70.766	15.509	1418.71	310.918	0.045	11.193	792.054
28	Z_5	15.81	8.44	8.32	70.221	15.498	1409.44	311.072	0.046	11.424	802.183
29	Z_6	15.8	8.46	8.31	70.303	15.505	1408.76	310.693	0.046	11.4	801.427
30	average	15.81	8.42	8.33	70.08	15.50	1409.05	311.74	0.05	11.28	790.79
31	std	0.02	0.05	0.03	0.46	0.01	5.95	1.24	0.00	0.12	10.37

Anexo II

Na análise de convergência, os resultados de tensão que se pretendem comparar referem-se apenas aos elementos que pertencem à célula de base unitária central da microestrutura. Na figura A.1 está representada uma célula de base unitária, discretizada por uma malha de E.F. $10 \times 10 \times 10$, e que mostra a ordem pela qual os mesmos estão numerados. Por sua vez, para um fator de escala $n > 1$, as células de base unitárias são geradas primeiro segundo x e depois segundo y e finalmente z .

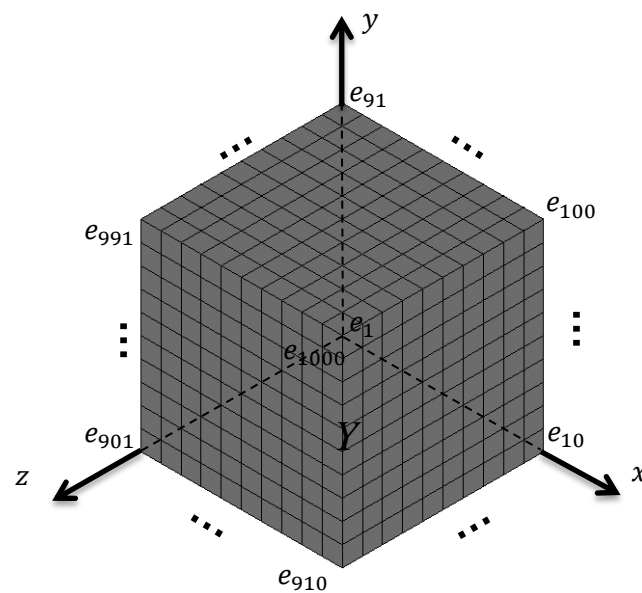


Figura A.1: Representação da célula de base unitária discretizada por uma malha $10 \times 10 \times 10$ e respetiva ordem na numeração dos elementos que a constituem.

O ANSYS contém funções que permitem fazer seleção de elementos de formas diferentes, no entanto, algumas revelaram-se mais expeditas do que outras. De fato, foram implementadas duas formas diferentes para o fazer, sendo que uma delas mostrou ser pouco eficiente, levando a um custo computacional elevado. Esta primeira abordagem passou por implementar um algoritmo (parametrizado para qualquer dimensão de malha de E.F. e fator de escala n) que selecionava os elementos da célula central com base na posição espacial dos 8 nós pertencentes a cada um desses elementos (comandos NSEL e ESLN do ANSYS). Assim, o algoritmo continha um ciclo que percorria a célula central da microestrutura, por ordem crescente do número do elemento, e ia guardando em memória os valores da tensão resultantes do carregamento aplicado, para cada um. Contudo, verificou-se que, apesar de funcionar, esta abordagem tinha um custo computacional demasiado alto, provavelmente devido ao programa

utilizar um algoritmo de identificação enumerativo que para malhas grosseiras funciona rápido mas fica muito lento para malhas mais refinadas. Posto isto, foi necessário utilizar uma alternativa.

A segunda abordagem baseou-se em determinar a numeração do primeiro elemento da célula central, correndo depois um algoritmo para a identificação dos restantes elementos e guardando em memória para cada um deles os valores das componentes da tensão e von-Mises. Mesmo assim, esta abordagem apresentou alguns desafios que são explicados em seguida.

Quando se considera o fator de escala $n = 1$, a recolha dos valores de tensão, pela forma descrita no parágrafo anterior, é trivial porque a numeração dos elementos é bem conhecida e sequencial, logo a aplicação de um ciclo DO é simples e direta. Porém, para um fator de escala $n > 1$ já não é trivial e surgem ainda duas situações distintas. Por um lado, para um fator de escala n ímpar a numeração dos elementos na célula central é sequencial, mas a numeração do primeiro elemento da célula não é conhecida e varia com a dimensão N da malha e o número n de repetições (ou fator de escala). Logo, para um número de repetições ímpar, a numeração do primeiro elemento da célula central é determinada por:

$$\left(\frac{n^2}{2} - \frac{1}{2}\right) \times N^3 + n^2 \times N^3 \times \left(\frac{n}{2} - \frac{1}{2}\right) + 1 \quad (\text{A.1})$$

Veja-se, por exemplo, na figura A.2 o elemento número 13001 que é o primeiro elemento da célula central para o caso $n = 3$ (substitua-se na fórmula anterior $N = 10$ e $n = 3$). A identificação da numeração dos restantes elementos da célula é trivial, na medida em que é sequencial (com incrementos de 1) até chegarmos ao último elemento, número 14000.

Por outro lado, para um fator de escala n par, a numeração do primeiro elemento da célula central é agora determinado através da expressão:

$$\left(\frac{n^2}{2} - \frac{n}{2} - 1\right) \times N^3 + n^2 \times N^3 \times \left(\frac{n}{2} - 1\right) + 1 + \frac{1}{2}(N + N^2 + N^3) \quad (\text{A.2})$$

Contudo, a numeração dos restantes elementos da célula central não é completamente sequencial. Tal acontece porque existem n^3 cubos (em cada cubo a numeração dos elementos é sequencial) mas quando n é par a célula central deixa de ter numeração sequencial de elementos porque resulta da junção de oitavos de alguns desses cubos. Existem saltos na numeração dos elementos entre as interfaces de oitavos da célula central, conforme está exemplificado na figura A.3 para o caso $n = 2$. Estes saltos na numeração dos elementos são devidamente identificados através da aplicação das seguintes fórmulas, um salto na direção x calcula-se através de

$$N^3 - \frac{N}{2} \quad (\text{A.3})$$

um salto na direção y calcula-se através de

$$N^3 \times n - \frac{N^2}{2} \quad (\text{A.4})$$

um salto na direção z calcula-se através de

$$n^2 \times N^3 - \frac{N^3}{2} \quad (\text{A.5})$$

Na figura A.3 os saltos na numeração, obtidos por estas fórmulas, estão esquematicamente representados nas três direções espaciais e valem 995, 1950 e 3500, respetivamente.

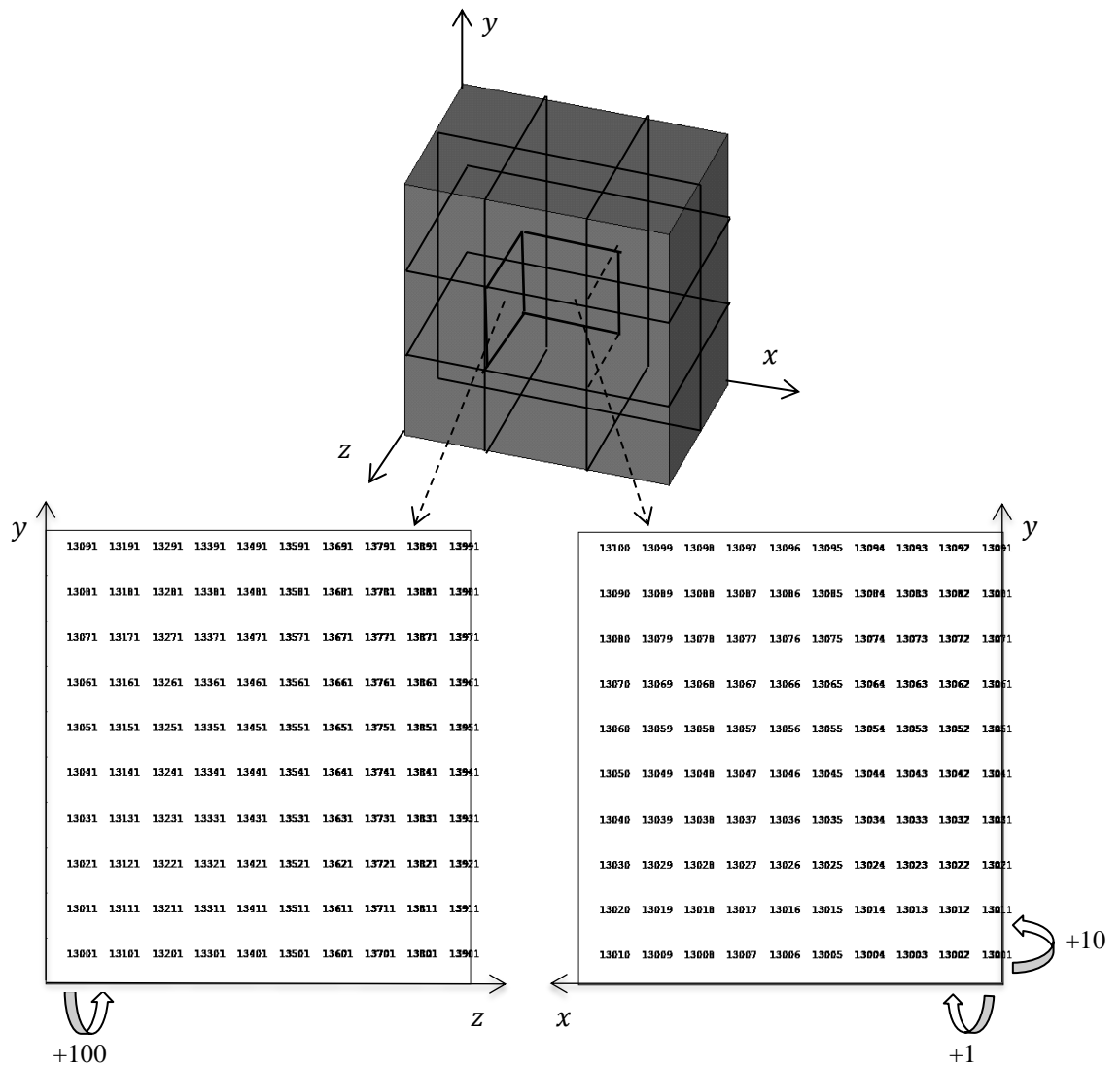


Figura A.2: Representação da célula unitária central para um fator de escala $n = 3$ e numeração dos elementos na parede esquerda (à esquerda) e traseira (à direita).

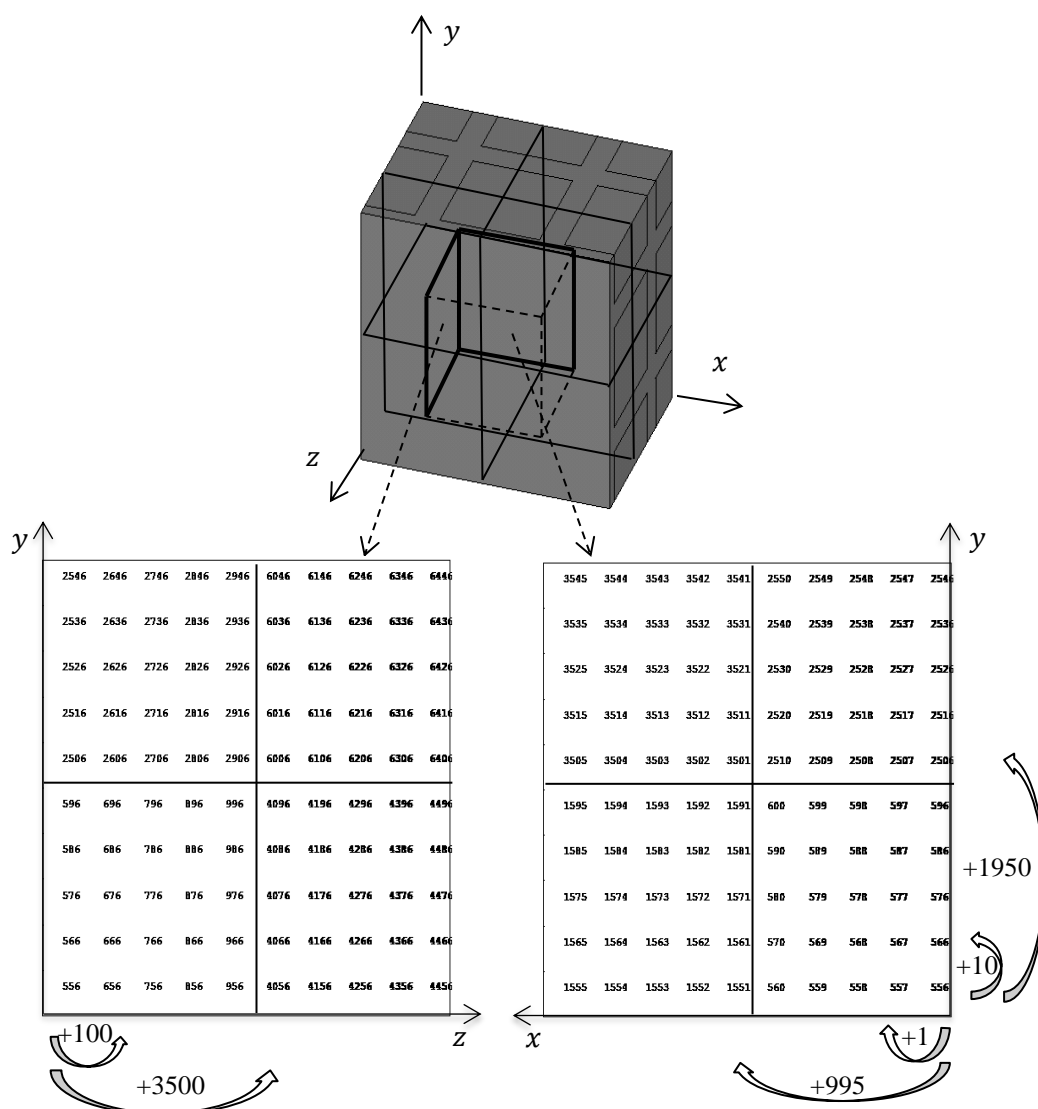


Figura A.3: Representação da célula unitária central para um fator de escala $n = 2$ e numeração dos elementos na parede esquerda (à esquerda) e traseira (à direita).

Anexo III

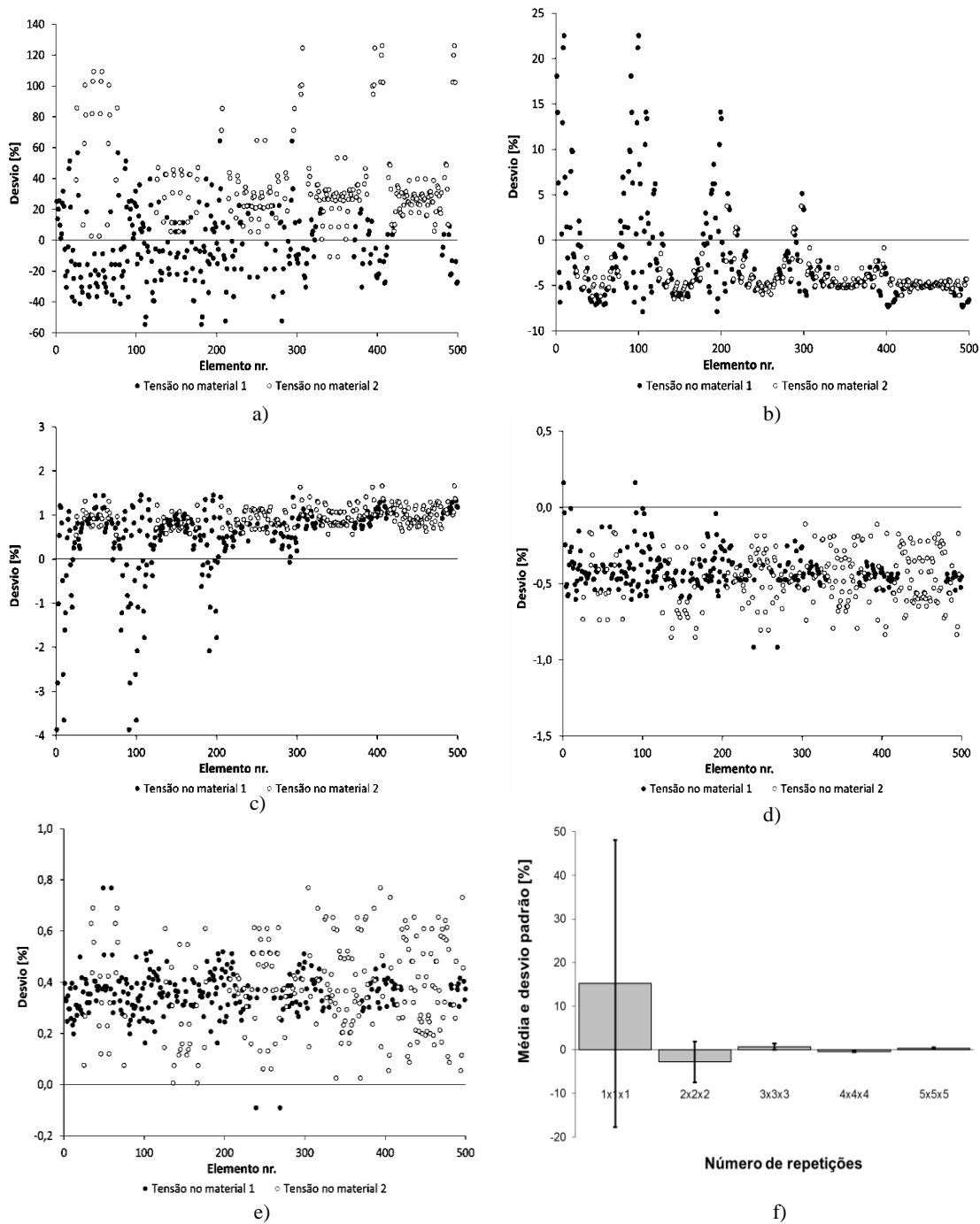


Figura A.4: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Corte2** com constrangimento de permeabilidade e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Neumann. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) 1x1x1; b) 2x2x2; c) 3x3x3; d) 4x4x4; e) 5x5x5; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

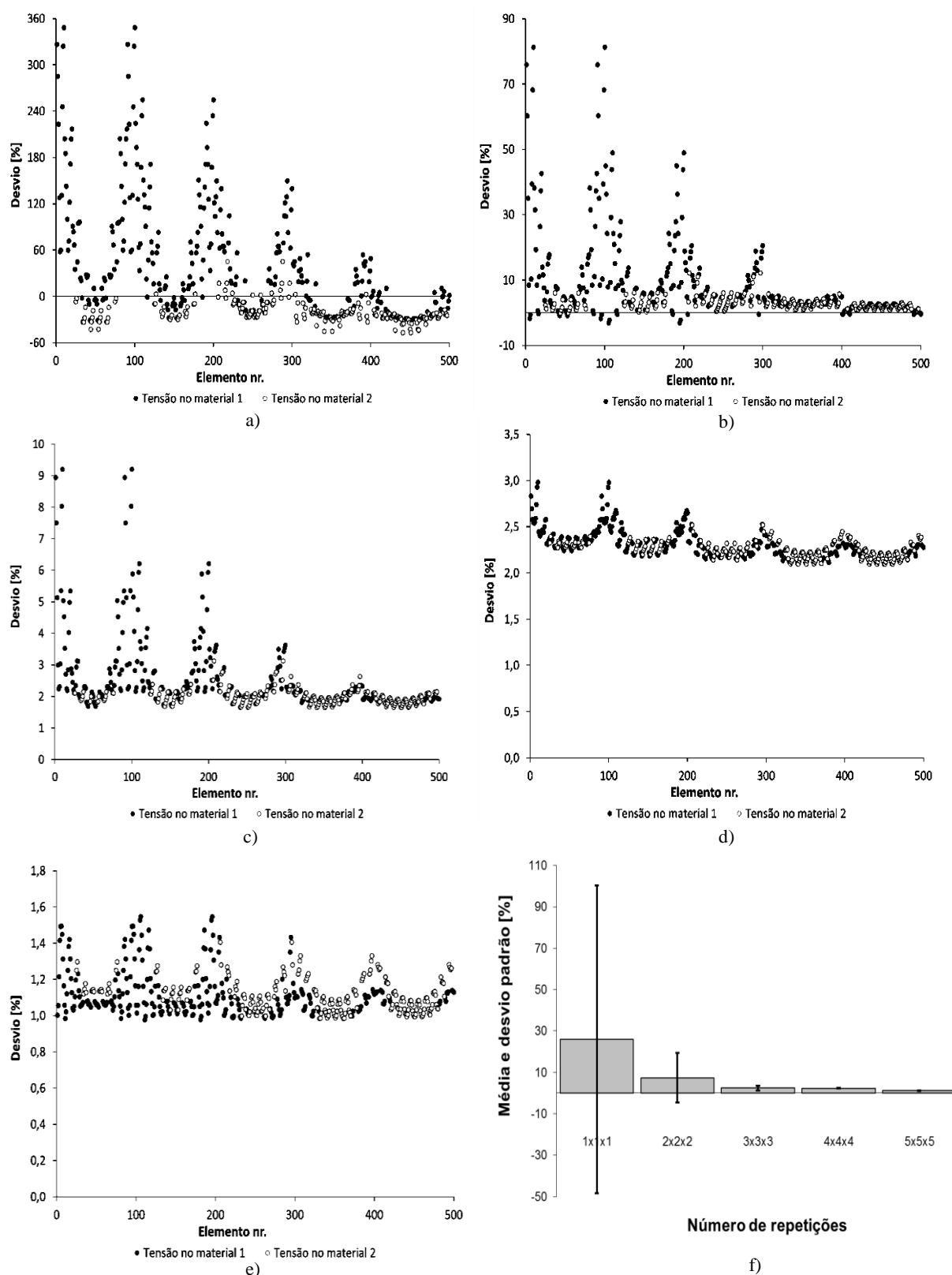


Figura A.5: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Corte2** com constrangimento de permeabilidade e material compósito $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^1$ com C.F. de Dirichlet. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) 1x1x1; b) 2x2x2; c) 3x3x3; d) 4x4x4; e) 5x5x5; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

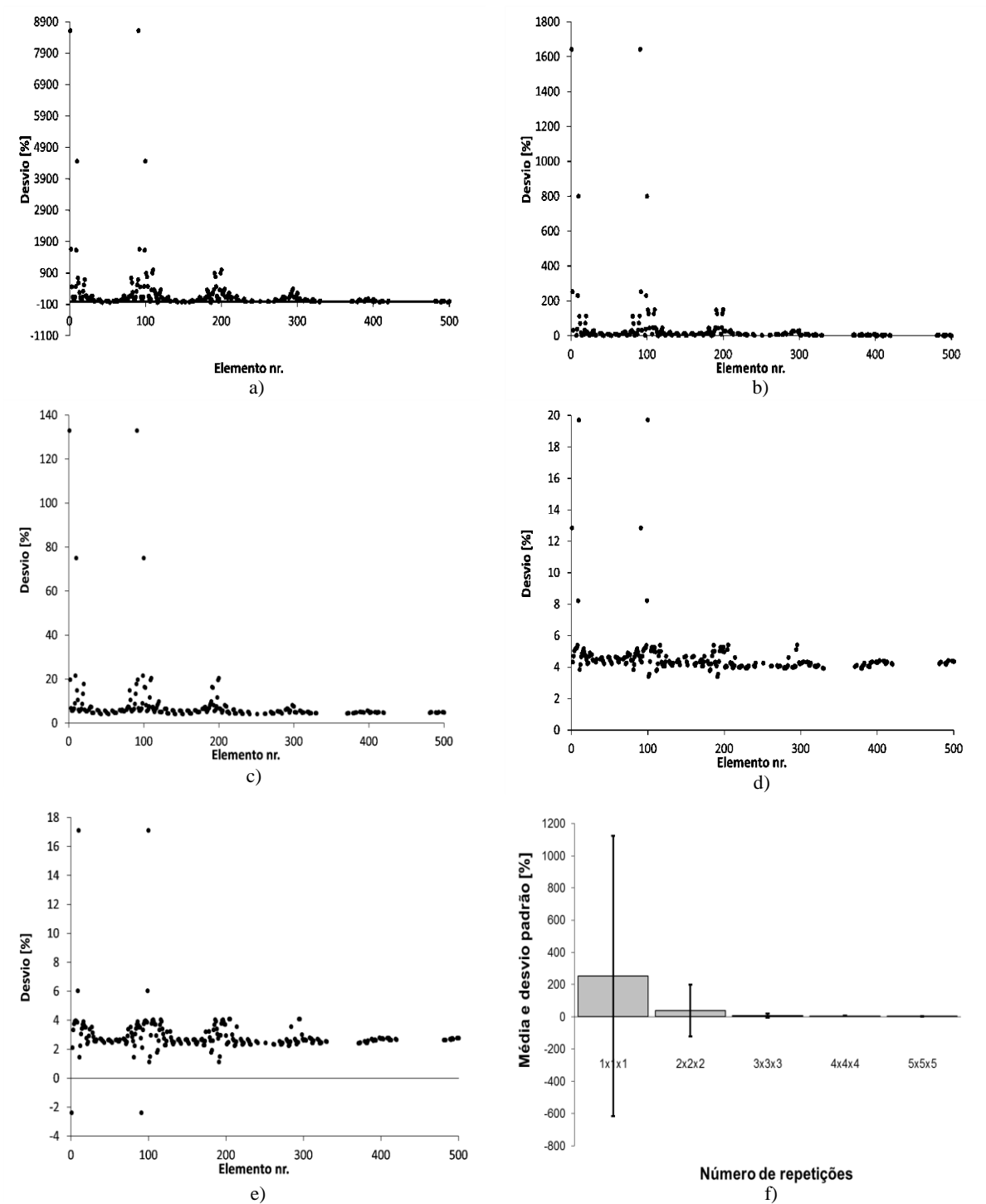


Figura A.6: Análise de efeitos de escala para caso de carga **Corte2** com constrangimento de permeabilidade e material celular $\frac{E_{MAT1}}{E_{MAT2}} = 10^{12}$ com C.F. de Dirichlet. Desvio calculado pela Eq. (5.2) em todos os elementos da célula central unitária para diferentes fatores de escala: a) 1x1x1; b) 2x2x2; c) 3x3x3; d) 4x4x4; e) 5x5x5; f) resumo estatístico em termos de média e desvio padrão.

Tabela A.2: Resumo estatístico dos desvios representados nas figuras A.4 a A.6. Média \bar{e} , desvio padrão s e desvios extremos (max e min) são apresentados [%].

C.F.	Rácio	Medidas	1×1×1	2×2×2	3×3×3	4×4×4	5×5×5
<i>Neumann</i>	10^1	<i>max</i>	126,112	22,524	1,659	0,163	0,769
		\bar{e}	15,170	-2,811	0,689	-0,437	0,365
		<i>min</i>	-54,635	-7,866	-3,870	-0,916	-0,091
		<i>s</i>	32,913	4,674	0,743	0,156	0,138
<i>Dirichlet</i>	10^1	<i>max</i>	348,202	81,261	9,199	2,980	1,545
		\bar{e}	25,968	7,408	2,430	2,301	1,118
		<i>min</i>	-47,020	-3,233	1,645	2,095	0,977
		<i>s</i>	74,319	12,001	1,110	0,143	0,114
	10^{12}	<i>max</i>	8613,872	1642,596	132,964	19,721	17,122
		\bar{e}	253,634	39,391	8,071	4,623	2,912
		<i>min</i>	-40,384	-7,142	4,150	3,396	-2,382
		<i>s</i>	870,893	161,626	12,971	1,607	1,475